



---

UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA  
ESCOLA TÈCNICA SUPERIOR DE D'ENGINYERIA INDUSTRIAL DE BARCELONA  
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA

# **ESTUDIO NUMÉRICO DEL TRANSPORTE DE BURBUJAS DE HELIO EN METAL LÍQUIDO APLICADO A TECNOLOGÍA DE FUSIÓN NUCLEAR**

**DAYANA MENDES LOUZADA DE PAULA**

TRABAJO DE INVESTIGACIÓN PARA EXTRANJEROS  
TUTORES: ELISABET MAS DE LES VALLS  
Y LLUÍS BATET

**JUNIO 2013**

---



## RESUMEN

La posibilidad de que exista nucleación de helio dentro de las envolturas regeneradoras de metal líquido no es remota. En caso de existir, las consecuencias en la eficiencia térmica del reactor y en el control de tritio podrían ser importantes. Por esto, estas consecuencias deben ser bien estudiadas para no comprometer la viabilidad tecnológica de la fusión nuclear como fuente alternativa de energía eléctrica. En este contexto, este proyecto se centra en el estudio del flujo bifásico en los canales de metal líquido. El proyecto se ha desarrollado en torno al código numérico de mecánica computacional *OpenFOAM*. En el capítulo 1, aparte de introducir la motivación, el objetivo y la metodología del presente trabajo, se hace una breve exposición de la tecnología de fusión nuclear y, concretamente, de las envolturas regeneradoras. A continuación, en el capítulo 2, se define el fenómeno del flujo bifásico. En el capítulo 3 se procede al estudio de dos posibles modelos y a la selección del modelo a utilizar en el presente estudio. El modelo bifásico utilizado sigue un método Euler-Euler, donde se consideran dos fases continuas, una para cada medio (metal líquido/burbujas de helio), y el intercambio de momento, que es determinado por las fuerzas instantáneas de *drag*, *lift* y *virtual mass*. En el capítulo 4, el modelo seleccionado ha sido validado a partir de datos experimentales y soluciones de otros autores. A continuación, en el capítulo 5, el modelo elegido ha sido aplicado al caso de interés, un canal simplificado del *breeding blanket* HCLL, donde se propone evaluar los efectos en la hidrodinámica del flujo de metal líquido cuando se somete a diferentes números de Reynolds, diámetros de burbujas y producción de helio. Los resultados indican que el tamaño de las burbujas formadas es el factor de mayor influencia en la hidrodinámica del fluido dentro de los canales de HCLL. Cuanto mayores son las burbujas, más influencia ejercen las fuerzas de drag, lift y virtual mass sobre el fluido. Efectivamente, si las burbujas son suficientemente pequeñas (nano-burbujas), para elevados números de Reynolds, se puede considerar el transporte de helio como un escalar pasivo. En contrapartida, para burbujas mayores (micro-burbujas), la influencia de la burbuja es tan grande que ni el Reynolds y ni el factor de generación de helio afecta en el resultado final, pero el flujo se ve totalmente modificado por la presencia de burbujas.



# SUMARIO

<b>Resumen</b> .....	<b>i</b>
<b>Sumario</b> .....	<b>iii</b>
<b>Nomenclatura</b> .....	<b>v</b>
<b>1. Introducción</b> .....	<b>1</b>
1.1 Motivación.....	1
1.2 Objetivo .....	2
1.3 Tecnología de Fusión Nuclear .....	2
1.3.1 Tritium Breeding Blankets .....	4
1.3.2 Nucleación de Helio.....	6
1.4 Estado del arte.....	7
1.5 Metodología.....	7
<b>2. Fenómeno de flujo multifásico</b> .....	<b>9</b>
2.1 Flujo bifásico gas-líquido.....	10
2.2 Bubble column .....	12
2.3 Modelos Euler-Euler y Euler-Lagrangian .....	15
2.4 Ecuaciones Generales.....	16
<b>3. Selección del modelo</b> .....	<b>21</b>
3.1 OpenFOAM.....	21
3.2 Comparativa.....	23
3.2.1 Tutorial BubbleColumn.....	24
3.2.2 Condiciones Iniciales y de contorno .....	25
3.2.3 Propiedades físicas y modelos.....	25
3.2.4 Resultados .....	25
3.3 Conclusiones .....	32

4.	Validación del modelo.....	33
4.1	Experimento .....	33
4.2	Estudios Previos.....	37
4.3	Estudio con TwoPhaseEulerFoam.....	39
4.3.1	Definición del caso .....	39
4.3.2	Estrategia numérica.....	42
4.3.3	Resultados.....	43
4.4	Conclusiones .....	58
5.	Caso de aplicación: HCLL.....	61
5.1	Introducción .....	61
5.2	Caso de estudio .....	62
5.3	Estrategia numérica.....	64
5.4	Resultados.....	66
5.4.1	Micro diámetro .....	67
5.4.2	Nano diámetro .....	73
5.4.3	Conclusiones .....	75
6.	Conclusiones .....	77
	<b>Anexo – TwoPhaseEulerFoam .....</b>	<b>79</b>
	<b>Listado de figuras .....</b>	<b>87</b>
	<b>Listado de tablas .....</b>	<b>91</b>
	<b>Referencias bibliográficas .....</b>	<b>93</b>

# NOMENCLATURA

## *Acrónimos*

CFD	Computational Fluid Dynamics
CPS	Coolant Purification System
DEMO	DEMOstration Power Plant
GPL	General Public License
HCLL	Helium-Cooled Lithium-Lead
HCPB	Helium-Cooled Pebble-Bed
ITER	International Thermonuclear Experimental Reactor
RANS	Reynolds-Averaged Navier-Stokes
TBB	Tritium Breeding Blanket
TES	Tritium Extraction System

## *Letras romanas*

$A_{\text{sección}}$	Área de la sección rectangular, $\text{m}^2$
$A_{\text{sparger}}$	Área del sparger, $\text{m}^2$
$C_D$	Coeficiente de arrastre (drag), adimensional
$C_{\text{lift}}$	Coeficiente de elevación (lift), adimensional
$C_{\text{vm}}$	Coeficiente de masa virtual (virtual mass), adimensional
$C_M$	Parámetro del modelo de turbulencia k- $\epsilon$ , adimensional
$C_t$	Coeficiente de respuesta de turbulencia, adimensional
$C_1$	Constante del modelo de turbulencia k- $\epsilon$ , adimensional
$C_2$	Constante del modelo de turbulencia k- $\epsilon$ , adimensional
$d$	Diámetro de las partículas, m
$D_{\text{sparger}}$	Diámetro del distribuidor de aire, m
$g$	Aceleración de gravedad, $\text{m/s}^2$
$G$	Producción de la energía cinética de turbulencia, adimensional
$I$	Matriz Identidad, adimensional
$M$	Transferencia de momento en la interface, $\text{kg/m}^2.\text{s}^2$

$M_{\text{drag}}$	Momento de arrastre, $\text{kg}/\text{m}^2.\text{s}^2$
$M_{\text{lift}}$	Momento de elevación, $\text{kg}/\text{m}^2.\text{s}^2$
$M_{\text{vm}}$	Momento de masa virtual, $\text{kg}/\text{m}^2.\text{s}^2$
$p$	Presión, Pa
$\text{Re}$	Tensor de tensiones de Reynolds, $\text{N}/\text{m}^2$
$S_\alpha$	Término de generación de burbujas de aire, $\text{N}/\text{m}^2$
$t$	Tiempo, s
$U$	Vector de velocidad, $\text{m}/\text{s}$
$w$	Velocidad superficial, $\text{m}/\text{s}$

#### *Letras griegas*

$\alpha$	Fracción de volumen de la fase dispersa, adimensional
$\beta$	Fracción de volumen de la fase continua, adimensional
$\varepsilon$	Tasa de disipación turbulenta, $\text{m}^2/\text{s}^3$
$\kappa$	Energía cinética de turbulencia, $\text{m}^2/\text{s}^2$
$\nu$	Viscosidad cinemática, $\text{m}^2/\text{s}$
$\nu_{\text{eff}}$	Viscosidad cinemática efectiva, $\text{m}^2/\text{s}$
$\rho$	Densidad, $\text{kg}/\text{m}^3$
$\tau$	Tensor de tensiones laminar, $\text{N}/\text{m}^2$
$\sigma_k$	Numero de Schimidt para turbulencia, adimensional



# 1. INTRODUCCIÓN

## 1.1 MOTIVACIÓN

La Tecnología de Fusión Nuclear es una energía alternativa que tiene el potencial de hacer una gran contribución a un sistema de producción y suministro de energía, que sea sustentable, seguro y auto sostenible, lo que sería un gran avance para la sociedad. En contrapartida, aún no se ha conseguido demostrar su viabilidad tecnológica. Por esto, en la actualidad, dentro de los proyectos ITER y DEMO, se están realizando estudios de los componentes críticos necesarios. Uno de estos componentes son las envolturas regeneradoras (de tritio), también denominadas *breeding blankets*.

Puesto que los *breeding blankets* son la única fuente posible de generación del tritio, combustible de la reacción de fusión, se trata de un componente imprescindible para hacer posible el uso de la tecnología de fusión nuclear. Dentro de los distintos diseños propuestos de *breeding blankets*, este trabajo se ha fijado en el estudio del tipo de *breeding blanket* llamado HCLL, que trabaja con metal líquido PbLi como material productor de tritio y con helio como fluido refrigerante. En este diseño, el metal líquido reacciona con los neutrones acelerados provenientes de la fusión y genera el tritio, que es posteriormente extraído y utilizado como combustible de la fusión.

En la reacción de producción de tritio se produce helio en la misma proporción. Esto puede dar lugar a la formación (nucleación) de burbujas de helio en los canales de metal líquido. Dichas burbujas pueden tener efectos considerables sobre la permeación del tritio a través de las paredes del canal, la eficiencia térmica y el aumento de la pérdida de carga en las envolturas al variar la conductividad eléctrica del fluido.

Por esto, estudiar el posible fenómeno de formación de burbujas de helio y sus efectos son de gran importancia para los *breeding blankets*. Este trabajo es un primer paso para el estudio de los flujos bifásicos y sus efectos en el sistema HCLL.

## 1.2 OBJETIVO

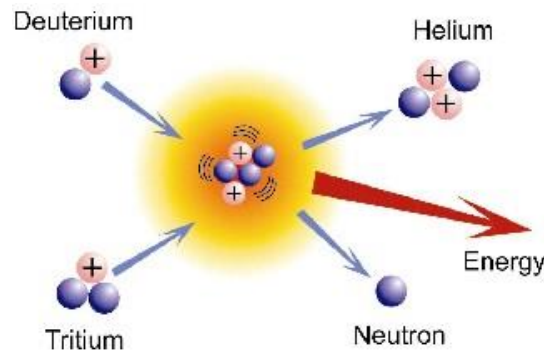
Este proyecto se centra en el estudio de flujo bifásico, concretamente en el régimen de flujo en burbujas, desarrollado en torno al código numérico de mecánica de fluidos computacional *OpenFOAM*, aplicado al estudio del *breeding blanket* de tipo HCLL.

## 1.3 TECNOLOGÍA DE FUSIÓN NUCLEAR

Las reacciones de fusión nuclear son aquellas donde dos o más núcleos atómicos, de bajo peso molecular, colisionan a una velocidad muy alta y se unen a fin de formar un nuevo núcleo atómico. Es el proceso que alimenta el sol y las estrellas, por ejemplo. El uso de la fusión nuclear como una fuente de energía alternativa es una propuesta muy atractiva, pues se trata de una tecnología limpia, segura y muy productiva. La fusión es capaz de cubrir la creciente demanda energética, la reacción no produce CO<sub>2</sub> ni otro contaminante atmosférico, el residuo radioactivo generado tiene una vida corta y no hay reacciones en cadena dentro del reactor.

Para reproducir este proceso de fusión, es necesario calentar los gases combustibles a una temperatura extremadamente alta, cerca de 200 millones de grados Celsius, por lo cual los átomos se tornan completamente ionizados y la reacción tiene lugar en estado de plasma. Para proteger las paredes del reactor de estas elevadas temperaturas es imprescindible alejar el plasma de la pared mediante un campo magnético (Fuente: Fusion for Energy).

La reacción de fusión que más fácilmente puede alcanzar los objetivos esperados para una fuente energética es la reacción entre deuterio (D) y tritio (T), dos isótopos de hidrógeno. El deuterio puede ser obtenido a partir del mar y el tritio puede ser regenerado en el propio reactor. Cuando los dos reaccionan, se genera un átomo de helio y mucha energía (**Figura 1**), (Fuente: Fusion for Energy).



**Figura 1.** Reacción de fusión entre deuterio y tritio, isótopos de hidrógeno.

En la actualidad, el principal proyecto en desarrollo es ITER (*"The way"* en latín), un experimento científico internacional de larga escala iniciado hace veinte años con el objetivo de probar que es posible producir energía comercial a partir de la fusión nuclear. ITER busca proporcionar a los científicos e ingenieros el desarrollo de conocimiento y tecnologías necesarias para acceder a las próximas etapas de la producción de electricidad mediante plantas de fusión (Fuente: ITER Organization). Otro proyecto, en principio basado en los resultados de ITER, es DEMO, que es un experimento con el objetivo de demostrar una planta energética comercial de fusión nuclear (Taylor, 2012).

Uno de los desafíos de la fusión nuclear es la obtención de tritio, uno de los combustibles utilizados. Como no está disponible en la naturaleza, resulta necesario desarrollar otra forma de obtenerlo. La manera más viable e interesante encontrada es la producción del tritio en los *breeding blankets*, por medio de la interacción de los neutrones que escapan del plasma con el litio contenido en el *blanket*, que rodea la zona de reacción. Después de ser generado, el tritio debe ser recuperado por el Sistema de Extracción de Tritio, TES, y volver al plasma para reaccionar con deuterio (Thakker et al., 2012). Si en ITER se probara la viabilidad tecnológica de los *blankets* juntamente con los reactores de fusión, se tendría una fuente muy productiva y limpia de energía, como también se tendría una fuente autosuficiente en combustible.

### 1.3.1 TRITIUM BREEDING BLANKETS

El concepto de producción, o *breeding*, del tritio durante la reacción de fusión es importante para abastecer la futura necesidad de plantas de fusión de gran escala. Como en la actualidad no hay ninguna otra posibilidad de suministro o fuente de tritio, el correcto diseño de los *breeding blankets* es esencial para el futuro de la fusión nuclear.

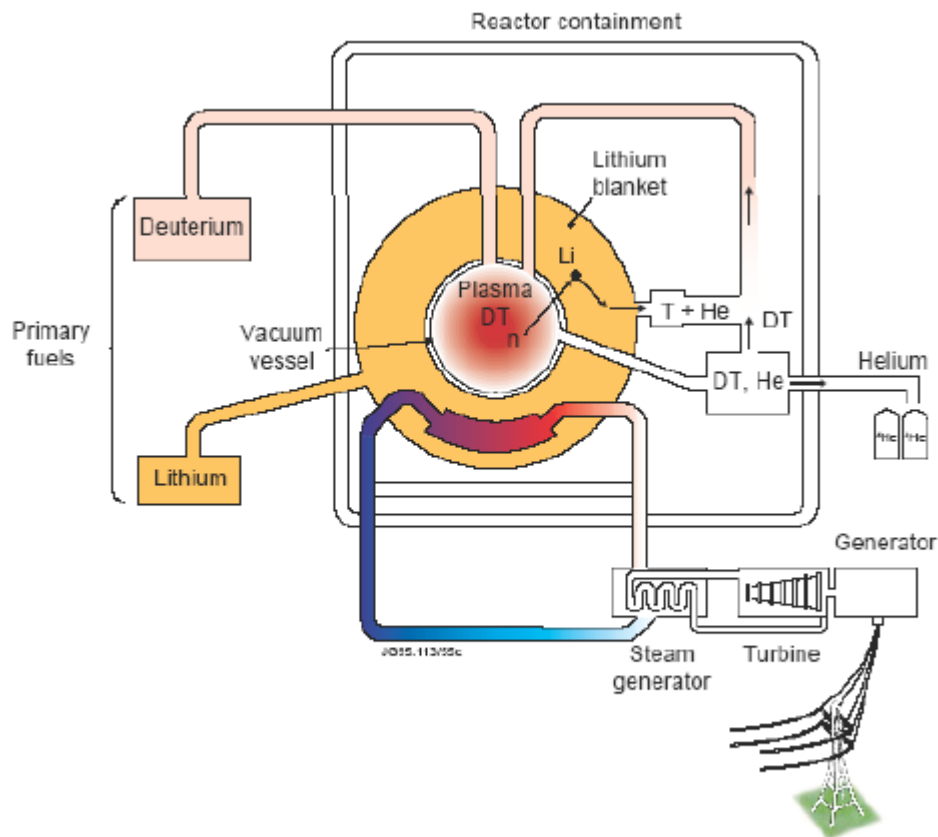
Los *Tritium Breeding Blankets* (TBB) son las maquetas de los *breeding blankets* utilizadas en los proyectos ITER y DEMO, que sirven como testes para explorar las técnicas y condiciones viables para la producción de tritio como combustible de la fusión nuclear. La perfecta adaptación y utilización de los TBBs, llevaría a una autosuficiencia de tritio y al mayor rango de extracción de calor y producción de electricidad.

Los *blankets* cubren todo el interior de la cámara de vacío donde ocurre la reacción. Funcionan como blindaje a la cámara y a las bobinas, dando protección frente al calentamiento y flujo de neutrones que escapan de la reacción de fusión. Estos neutrones son moderados en el *blanket*, con lo que su energía cinética es transformada en energía térmica, que posteriormente puede ser utilizada para producir energía eléctrica (Fuente: ITER Organization). Además, en el *breeding blanket* también ocurre la multiplicación de neutrones y la reacción de producción de tritio, que es su función principal.

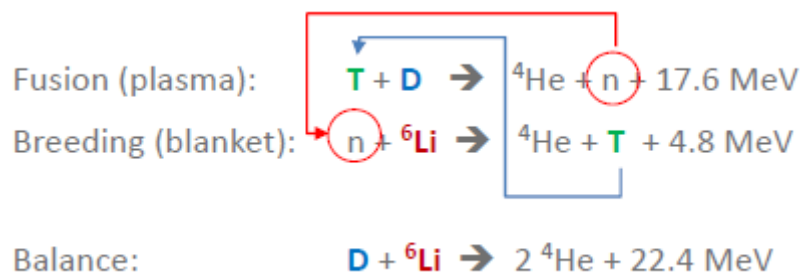
El programa europeo de tecnología de fusión considera apenas dos conceptos diferentes de TBB, que son el HCPB (Helium-Cooled Pebble-Bed) y el HCLL (He-Cooled Lithium-Lead). Ambos tienen en común el material estructural, que son platos de acero EUROFER, y el refrigerante, que es Helio gas (8MPa, 300/500°C). La diferencia entre los dos modelos, es el material de producción del tritio, que es sólido ( $\text{Li}_2\text{TiO}_3/\text{Li}_4\text{SiO}_4$ , Be) para el HCPB y líquido ( $\text{Pb-15,7Li}$ ) para el HCLL, donde el plomo actúa como multiplicador de neutrones (Fischer et al., 2011).

Independientemente del material utilizado, los TBBs poseen básicamente el mismo funcionamiento y secuencia de operaciones: la reacción de fusión entre deuterio y tritio produce helio y neutrones, los neutrones reaccionan con el metal del *blanket* generando

tritio, que después de recuperado y es reutilizado como combustible en el reactor. La **Figura 2** presenta las reacciones implicadas en este proceso y un esquema de todo el funcionamiento, incluyendo la zona del plasma, el *blanket* y los sistemas auxiliares de Sistema de Extracción de Tritio (TES) y Sistema de Purificación de Refrigerante (CPS).



(a)



(b)

**Figura 2.** (a) esquema de operaciones de un TBB y (a) Reacciones implicadas en la fusión nuclear.

### 1.3.2 NUCLEACIÓN DE HELIO

Para los sistemas TBB-HCLL, grandes producciones de helio dentro de los canales de metal líquido del *blanket* pueden tener una significativa influencia en el diseño del sistema. Esto está correlacionado con la autosuficiencia de tritio requerida por la tecnología de fusión, pues las reacciones de generación de tritio y multiplicación de neutrones, que ocurren dentro del *breeding blanket*, implican una importante producción de helio (Batet et al., 2011).



El helio es insoluble en metal líquido, así como otros gases nobles. Esta característica, juntamente con las grandes tasas de producción de helio en los sistemas de HCLL, lleva a elevadas concentraciones de este gas por todos los canales de metal líquido, lo que puede provocar el fenómeno de nucleación de helio. La nucleación puede ocurrir de dos maneras, la primera es la nucleación homogénea, que es inducida debido a la saturación del sistema, mientras que la segunda es la nucleación heterogénea provocada por la porosidad de las superficies y las discontinuidades del fluido (Batet et al., 2011).

La posible cavitación de micro o nano burbujas de helio en los sistemas de fusión podrían provocar diversas consecuencias como el cambio de propiedades del flujo, la reducción de la transferencia de calor entre el metal líquido y el material estructural, la generación de sobrepresión en los canales y, principalmente, la disminución de la concentración de tritio en el metal líquido y de su permeación en el material estructural (Batet et al., 2011). Por tanto, como la nucleación de burbujas de helio puede afectar el funcionamiento de los *breeding blankets*, estudiar su grado de influencia en la eficiencia de estos sistemas es de gran relevancia.

## 1.4 ESTADO DEL ARTE

El estudio experimental, conocido como LIBRETTO (Conrad et al., 1991), estudió la liberación de tritio de la aleación eutéctica Pb-15,7Li. Durante este experimento, se detectó la formación de burbujas de helio en el circuito de HCLL y en los sistemas auxiliares.

A partir del análisis de estos testes, a fin de obtener una primera aproximación cuantitativa del fenómeno de nucleación de nano burbujas de helio, Batet et al. (2011), por medio de la fluido dinámica computacional, implementó un modelo con *OpenFOAM*, basado en la teoría clásica de nucleación añadida a un modelo de transporte de burbujas, donde se despreciaron efectos de coalescencia y colapso, así como las interacciones fluido-burbujas. Los resultados indicaron la presencia de un fenómeno complejo que puede afectar la transferencia de masa y la hidrodinámica del flujo de metal líquido.

Fradera et al. (2011), acopló el modelo de burbujas anteriormente mencionado con un modelo de transporte de tritio. La fracción de volumen de helio fue considerada como suficientemente baja para que el impacto de la absorción de tritio en el tamaño de las burbujas fuera despreciable. Los resultados obtenidos también demostraron la notable influencia de las burbujas en el flujo del sistema de HCLL.

Con la finalidad de complementar los estudios ya realizados acerca de la nucleación de helio en los sistemas de HCLL, este trabajo utiliza un modelo que tiene en cuenta las interacciones gas-liquido por medio de las fuerzas de *drag*, *lift* y *virtual mass*.

## 1.5 METODOLOGÍA

Para poder utilizar adecuadamente el código *OpenFOAM* en la aplicación de interés, ha sido imprescindible adquirir primero los conceptos básicos relativos a flujos bifásicos, resumidos en el capítulo 2.

En el capítulo 3, se ha descrito el código a estudiar y se ha realizado un estudio a fin de demostrar sus capacidades en un caso típico de flujo bifásico, concretamente en una columna de burbujas (*bubble column*). Para esto, se ha simulado el caso del tutorial del *OpenFOAM* “bubbleColumn” siguiendo dos posibles estrategias y se ha elegido la más apropiada para el presente estudio.

A continuación, en el capítulo 4 se ha intentado reproducir un caso experimental de flujo de burbujas en columna, con la finalidad de (1) validar el código y (2) generar *know-how* acerca de su utilización. Las simulaciones han sido comparadas con los datos experimentales y soluciones de otros autores.

Después de validar el modelo elegido, en el capítulo 5 se ha aplicado el código al caso de interés, un canal U del *breeding blanket* HCLL, donde se ha evaluado el efecto del comportamiento del flujo cuando está sometido a la influencia de diferentes números de Reynolds, diferentes diámetros de burbujas y distintas generaciones de helio.

En el capítulo 6 se ha presentado las conclusiones relacionadas con el código *OpenFOAM* y los resultados de la aplicación. También se han presentado algunas notas para trabajos futuros.



## 2. FENÓMENO DE FLUJO MULTIFÁSICO

Los flujos multifásicos están presentes en diversos procesos industriales, y su comprensión es de fundamental importancia para la optimización y seguridad de estas operaciones. En mecánica de fluidos, son considerados sistemas de fluidos multifásicos cualquier flujo donde haya dos o más fases distintas que se encuentran simultáneamente en la mezcla, teniendo en cuenta un nivel de separación entre las fases implicadas. Estos flujos pueden existir en varias formas dependiendo de la combinación de fases presentes. Los flujos bifásicos, por ejemplo, pueden ser clasificados en flujos gas-sólido, líquido-sólido o gas-líquido (Yeoh y Tu, 2010).

Una temática crítica de este estudio es la necesidad de modelar y predecir el comportamiento detallado de estos flujos y del fenómeno que generan. Hay tres maneras de analizar y modelar sistemas multifásicos. La primera es experimentalmente, por medio de modelos de laboratorio; la segunda es teóricamente, utilizando ecuaciones matemáticas y modelos para el flujo; y la tercera es computacionalmente, donde la complejidad de los flujos es reproducida a través de ordenadores modernos.

Ciertamente hay algunas aplicaciones donde modelos en gran-escala pueden ser representados en laboratorios. Pero en la mayoría de los casos, el modelo de laboratorio requiere una escala muy diferente del prototipo y tiene muchas otras limitaciones, lo que lleva a creer que abordajes teóricas o computacionales son esenciales y preferibles para obtener resultados fiables (Brenner, 2005).

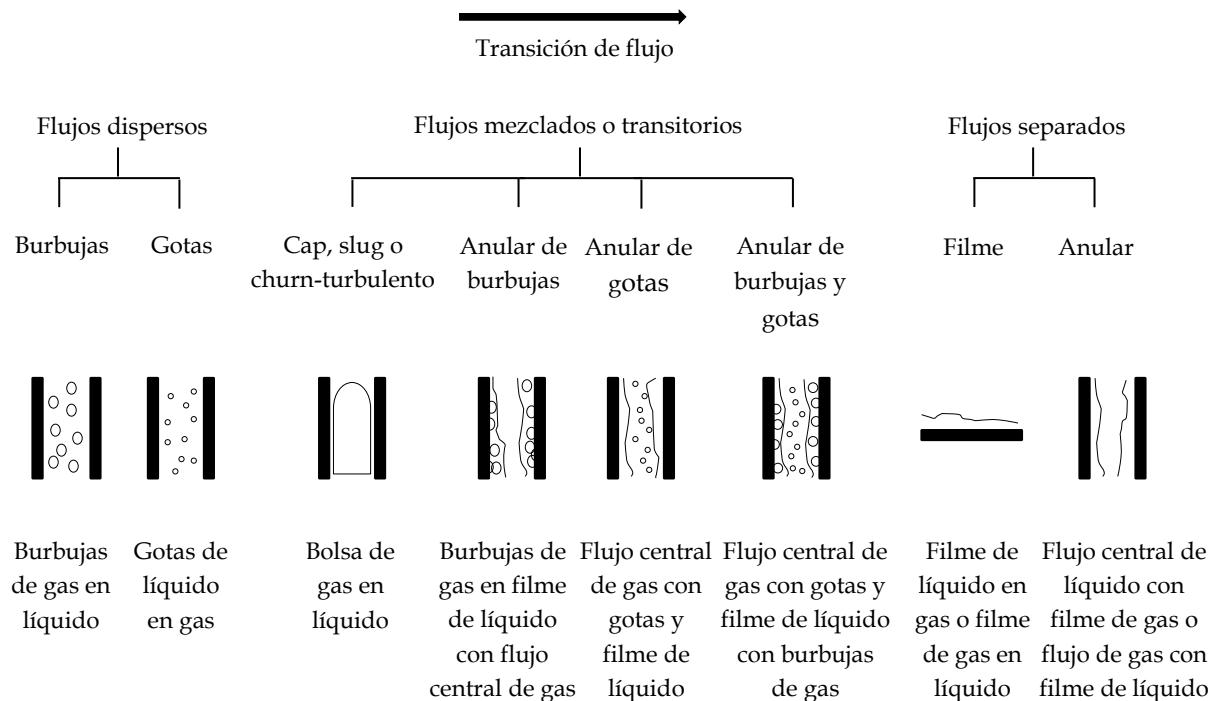
La gran dificultad de los modelos computacionales es describir las formulaciones conceptuales e interacciones de los flujos multifásicos. De un lado, los flujos de apenas una fase son bien conocidos, descritos por medio de ecuaciones de conservación de masa, momento y energía, complementadas por estados termodinámicos y transferencia de energía. En contrapartida, los flujos multifásicos son más complicados debido a la presencia de interfaces múltiples, móviles y deformables, lo que indica discontinuidades de las propiedades a lo largo de las interfaces y complicadas

características entre cada fase coexistente en el flujo (Yeoh y Tu, 2010). Por esto, se vuelve necesario introducir simplificaciones para reducir la complejidad del flujo multifásico, a fin de llevarlo a un nivel asequible. Los dos métodos más conocidos para reproducción de modelos bifásicos, con una fase continua y una dispersa, son el Euler-Euler y el Euler-Lagrangian.

## 2.1 FLUJO BIFÁSICO GAS-LÍQUIDO

Los flujos gas-liquido aparecen regularmente en procesos naturales e industriales con las más diferentes conformaciones, presentando siempre en las interfaces, complejas características de transferencia de masa, momento y energía. En la naturaleza, es posible experimentar el comportamiento de este tipo de flujo en las ondas del océano y en la dispersión de gotas marinas, por ejemplo. Ya en el campo industrial, el flujo gas-liquido es encontrado en una amplia variedad de procesos y aplicaciones como en reactores de *bubble column* en industrias químicas, petroquímicas y biológicas; en reactores nucleares de agua de ebullición y agua presurizada; calderas; trocadores de calor; y máquinas de combustión interna (Yeoh y Tu, 2010 y Delnoij et al., 1997).

Las configuraciones asumidas por el flujo bifásico gas-líquido pueden ser divididas mayoritariamente en tres categorías: flujo disperso, flujo mezclado o transitorio, y flujo separado (**Figura 3**).



**Figura 3.** Configuraciones de flujos bifásicos gas-líquido. Adaptación de Yeoh y Tu (2010).

El movimiento de burbujas en una corriente líquida, o al revés, movimiento de gotas de líquido en una corriente de gas, definen el flujo disperso. En este tipo de flujo, hay una fase continua, y una fase dispersa de constituyentes discretos. Estos constituyentes, sean burbujas o gotas, pueden sufrir deformación y por tanto presentar diferentes formatos. No obstante, en casi todos los casos, estos constituyentes son considerados como esferas (Yeoh y Tu, 2010).

El otro tipo de flujo es el mezclado o transitorio, donde la presencia de las dos fases es muy importante. En este flujo ocurren muchos cambios en las estructuras interfaciales que son provocadas por interacciones burbuja-burbuja debido a los efectos de coalescencia y colapso. Este flujo transitorio se caracteriza por ser un intermedio entre el flujo disperso y el flujo completamente separado (Yeoh y Tu, 2010).

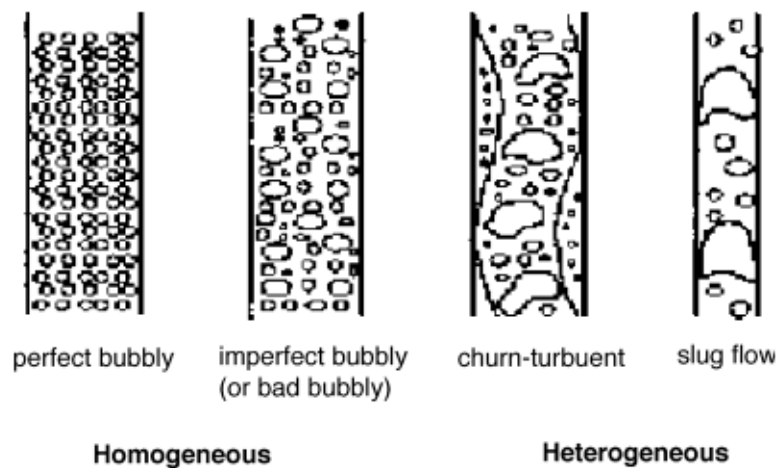
Finalmente, la última categoría de flujo gas-líquido es el separado, donde prácticamente los fluidos son inmiscibles y pueden ser tratados como mezclas bifásicas, teniendo en cuenta las dos fases como continuas (Yeoh y Tu, 2010).

## 2.2 BUBBLE COLUMN

Una de las aplicaciones industriales más común de sistemas multifásicos, más específicamente de flujos bifásicos gas-líquido, es el reactor de columna de burbujas, más conocido como *bubble column*. Básicamente se trata de un recipiente cilíndrico con una entrada de gas al fondo, donde el gas es inyectado en forma de burbujas en una fase líquida o en una suspensión liquido-sólido. Son equipos muy eficientes para situaciones donde es fundamental un área interfacial grande para la transferencia de masa gas-líquido y una eficiente mezcla para las especies reactivas de una amplia serie de reacciones gas-líquido, como oxidaciones, hidrogenaciones, halogenaciones, fermentaciones aeróbicas, entre otros procesos (Yeoh y Tu, 2010).

Los *bubble columns* son de gran interés para la ingeniería debido a su instalación sencilla, excelente capacidad de transferencia de calor y masa, bajo coste de instalación y mantenimiento (Kantarci et al., 2005). En contrapartida, aunque haya muchos estudios acerca del funcionamiento de los reactores *bubble column*, la gran desventaja de estos equipos es la falta de conocimiento sobre la dinámica de fluidos de sistemas bifásicos gas-líquido (Delnoij et al., 1997).

Muchos factores pueden influenciar en la hidrodinámica de los *bubbles columns*, como: las dimensiones de la columna, las condiciones de operación, las propiedades de las dos fases presentes en el sistema y, por fin, la velocidad de entrada del gas (Delnoij et al., 1997). Como resultado de estas influencias, es posible identificar tres tipos diferentes de régimen de flujo bifásico en *bubble columns*, que serían: burbujas dispersas (homogéneo), churn-turbulent (heterogéneo) y slugging (heterogéneo), (Bouaifi et al., 2001).

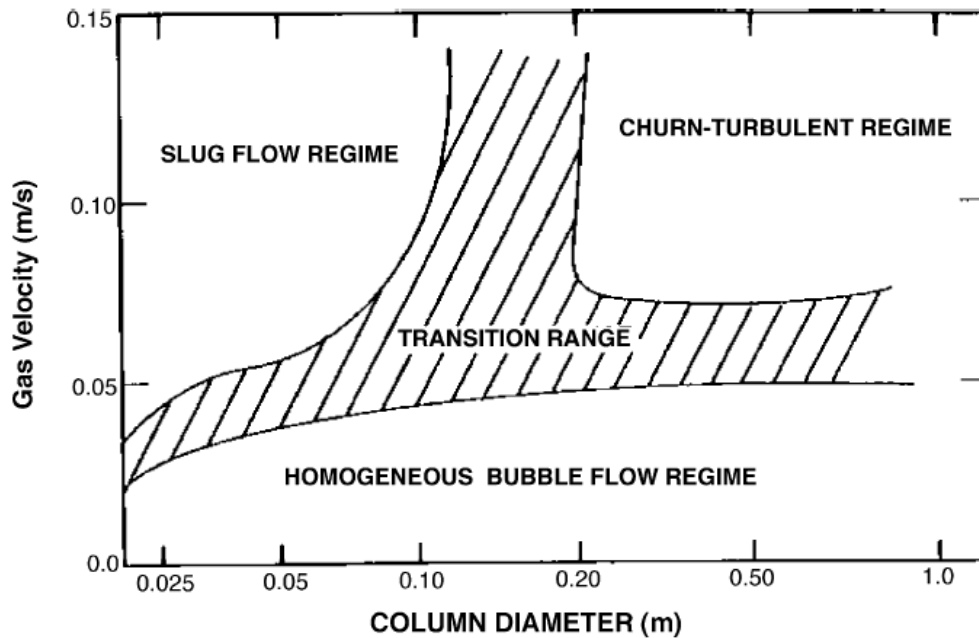


**Figura 4.** Configuraciones de régimen de burbujas en *bubble columns*. (Bouaifi et al., 2001).

Como es posible observar en la figura anterior, los flujos homogéneos en los *bubble columns* son más sencillos y son caracterizados por una distribución uniforme de burbujas de tamaños y velocidades aproximadamente iguales. Prácticamente no hay coalescencia ni colapso, lo que indica que es el distribuidor de gas en el sistema quien determina el tamaño de las burbujas. Ya en el régimen *churn-turbulent* hay una mayor variedad de tamaños de burbujas de gas debido a la presencia de interacción burbuja-burbuja que provoca la coalescencia y colapso de los constituyentes dispersos. En este caso, normalmente es posible identificar una circulación principal de burbujas que genera un flujo ascendente en el centro de la columna y un flujo descendente en las paredes. La presencia de vórtices al largo de la columna para el régimen *churn-turbulent* es común (Lin et al., 1996). Finalmente, el régimen *slug* ocurre en columnas de diámetro reducido. También cuenta con la coalescencia y colapso de burbujas y su característica más importante es la formación de grandes burbujas de gas que son estabilizadas por las paredes de la columna (Hyndman et al., 1997).

Generalmente, *bubble columns* operan en régimen homogéneo a velocidades superficiales bajas y en *churn-turbulent* o *slug* a velocidades superficiales altas. Flujos en régimen *slug* son observados básicamente en columnas de laboratorio con diámetro pequeño, mientras flujos de *churn-turbulent* son observados en columnas industriales (Hyndman et al., 1997). Deckwer et al. (1980) realizó sus estudios sobre la síntesis de *Fischer-Tropsch*, donde trató el reactor de suspensión como un sistema bifásico gas-

líquido, lo que le permitió hacer algunas conclusiones acerca de la velocidad superficial del gas, dimensión del diámetro y el régimen favorable en estas condiciones (**Figura 5**).



**Figura 5.** Relación de la velocidad del gas y de las dimensiones de la columna utilizada, con el régimen de flujo favorable (Deckwer et al. ,1980).

Para comprender mejor el comportamiento de la circulación bruta, también llamada de pluma de burbujas, y de la fase continua, es importante conocer la estructura local del flujo y los mecanismos que rigen este sistema. Esto es válido para los casos donde hay la formación de la pluma de burbujas, por tanto solo para las situaciones de régimen homogéneo y heterogéneo *churn-turbulent*. Así, teniendo como base la dinámica de las burbujas y los patrones de comportamiento del líquido, es posible observar 4 regiones diferentes en el régimen de flujo como se puede ver en la **Figura 6**. Estas regiones son identificadas como: región central de la pluma, región de flujo rápido de burbujas, región de flujo de vórtices y la región de flujo descendente (Lin et al., 1996).

De acuerdo con Lin et al. (1996), autores como Reese et al. (1993) y Chen et al. (1994), probaron cualitativamente que estructuras de flujo bifásico en sistemas 2D y 3D presentan las mismas regiones citadas anteriormente o regiones muy parecidas, lo que indicaría una buena aproximación de los sistemas bi y tridimensionales.

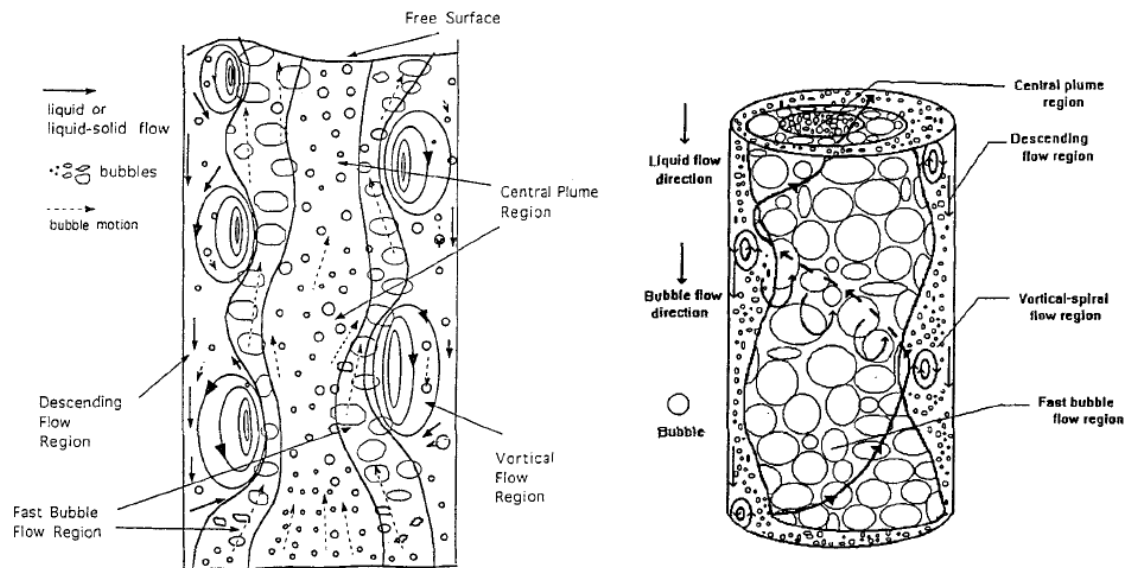


Figura 6. Regiones identificadas en el régimen de flujo para columnas en 2D y 3D (Lin et al., 1996).

## 2.3 MODELOS EULER-EULER Y EULER-LAGRANGIAN

Los métodos de solución por medio de la dinámica de fluidos computacional utilizan siempre una forma de discretización. Esto significa que todas las ecuaciones diferenciales, utilizadas como ecuaciones básicas de un modelo, son totalmente sustituidas por un sistema de ecuaciones algebraicas que son solucionadas a través de técnicas numéricas adecuadas. Por esto, diversos enfoques numéricos fueron sugeridos a fin de solucionar los mismos problemas de flujos. Los dos enfoques más conocidos para la modelización de flujos bifásicos gas-liquido son los modelos Euler-Euler y Euler-Lagrangian (Delnoij et al., 1997).

El método Euler-Euler, también conocido como modelo de dos fluidos, está basado en el concepto de interpenetración continua. Es decir, las dos fases son tratadas como continuas y por tanto pueden intercambiar propiedades, momento, energía y masa. Matemáticamente, las dos fases son representadas con la estructura Eulerian. Por otro lado, en el modelo Euler-Lagrangian la fase continua aún es representada por la estructura Eulerian, mientras la fase dispersa es de hecho tratada como burbujas

discretas, donde cada burbuja es rastreada a través de la fase continua, por medio de una ecuación de movimiento (Pan et al., 2000).

## 2.4 ECUACIONES GENERALES

Para el presente trabajo, se ha elegido el modelo Euler-Euler, pues se trata de un método más simplificado y más sencillo de manipular. Las ecuaciones básicas constituyentes de este modelo están presentadas a continuación. Es importante destacar que solo el intercambio de momento entre la fase dispersa y la fase continua fue llevado en cuenta, no se planteó intercambio de calor.

Para la modelización de la turbulencia, se siguió la estrategia RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*), es decir, se trabajó con las variables promediadas en el tiempo y se añadió un nuevo término de tensiones viscosas a la ecuación de momento.

La fracción de volumen (*void fraction*), representada por  $\alpha$  en las ecuaciones que siguen, es uno de los parámetros más importantes para caracterizar flujos bifásicos. Para flujos gas-líquido, este término puede ser definido como la fracción del volumen que está ocupado por la fase gaseosa.

### 1. Ecuación de continuidad para cada fase $\varphi$ .

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_{\varphi}\rho_{\varphi}) + \nabla \cdot (\alpha_{\varphi}\rho_{\varphi}U_{\varphi}) = 0 \quad (3)$$

### 2. Ecuación del momento $M_{\varphi}$ .

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_{\varphi}\rho_{\varphi}U_{\varphi}) + \nabla \cdot (\alpha_{\varphi}\rho_{\varphi}U_{\varphi}U_{\varphi}) + \nabla \cdot (\alpha_{\varphi}Re_{\varphi,eff}) = -\alpha_{\varphi}\nabla p + \alpha_{\varphi}\rho_{\varphi}g + M_{\varphi} \quad (4)$$

Donde el tercer término (**Ecuación 4**) define el tensor de tensiones de Reynolds, que representa las tensiones para cada fase y tensiones turbulentas:



$$\text{Re}_{\varphi,\text{eff}} = -\nu_{\varphi,\text{eff}} \rho_{\varphi} \left[ \nabla \mathbf{U}_{\varphi} + \nabla^T \mathbf{U}_{\varphi} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{U}_{\varphi}) \mathbf{I} \right] + \frac{2}{3} \rho_{\varphi} \kappa_{\varphi} \mathbf{I} \quad (5)$$

La variable  $k_{\varphi}$ , de la ecuación anterior, representa la energía cinética de turbulencia de las fases. Para la implementación de la simulación numérica es considerado que  $k_{\varphi}$  de la fase dispersa y de la fase continua son iguales.

$\nu_{\varphi,\text{eff}}$  es la viscosidad efectiva. Esta puede ser calculada sumándose la viscosidad molecular con la viscosidad turbulenta, como presentado a seguir:

$$\nu_{\varphi,\text{eff}} = \nu_{\varphi} + \nu_{\varphi,t} \quad (6)$$

El término  $\nu_{\varphi,t}$  de la **Ecuación 6** representa la viscosidad cinemática de turbulencia de una fase, y es definida como:

$$\nu_{\varphi,t} = C_{\mu} \frac{\kappa_{\varphi}^2}{\varepsilon_{\varphi}} \quad (7)$$

Donde  $C_{\mu}$  es una constante, y  $\varepsilon_{\varphi}$  es la tasa de disipación turbulenta de las fases.

El término  $M_{\varphi}$ , de la ecuación de momento (**Ecuación 4**), es descompuesto en fuerzas diferentes como en la contribución de arrastre (*drag*), la contribución de *lift* y la contribución de *virtual mass*.

$$M_{\varphi} = M_{\varphi,\text{drag}} + M_{\varphi,\text{lift}} + M_{\varphi,\text{vm}} \quad (8)$$

Utilizando  $d$  y  $c$  para identificar las dos fases del sistema, donde  $d$  representa la fase dispersa, mientras  $c$  la fase continua, es posible definir los términos de la ecuación anterior. De esta forma, el término de arrastre es descrito como:

$$M_{\phi,drag} = \frac{3}{4} \alpha_d \alpha_c \left( \frac{\alpha_c \rho_c C_{D,d}}{d_d} - \frac{\alpha_d \rho_d C_{D,c}}{d_c} \right) |U_r| U_r \quad (9)$$

Donde,  $U_r = U_d - U_c$  es el vector de velocidad relativa, y  $C_{D,d}$  y  $C_{D,c}$  son los coeficientes de arrastre para cada fase. Cuando  $Re$  asume un valor menor que 1000, el coeficiente de arrastre es considerado como igual a 0,44. Caso contrario, cuando  $Re$  es mayor o igual a 1000, los coeficientes  $C_{D,d}$  y  $C_{D,c}$  son obtenidos de acuerdo con las siguientes ecuaciones:

$$C_{D,\phi} = \frac{24}{Re_\phi} (1 + 0.15 Re_\phi^{0.687}) \quad (10)$$

$$Re_\phi = \frac{|U_\phi| d_\phi}{\nu_\phi} \quad (11)$$

Por otro lado, el término de *lift* es representado de la siguiente manera:

$$M_{\phi,lift} = \alpha_d \alpha_c (\alpha_c C_{l,d} \rho_c - \alpha_d C_{l,c} \rho_d) U_r \times \nabla \times U_c \quad (12)$$

Finalmente, el término de la fuerza de *virtual mass* es calculado de acuerdo con la siguiente ecuación:

$$M_{\phi,vm} = \alpha_d \alpha_c C_{vm} \rho_c \left( \frac{Dc}{Dt} U_c - \frac{Dd}{Dt} U_d \right) \quad (13)$$

Dónde:

$$\frac{Dc}{Dt} U_c = \frac{\partial U_c}{\partial t} + U_c \cdot \nabla U_c \quad (14)$$

$$\frac{Dd}{Dt}U_d = \frac{\partial U_d}{\partial t} + U_d \cdot \nabla U_d \quad (15)$$

### 1. El modelo de turbulencia.

Para añadir el efecto de la turbulencia al sistema bifásico disperso, se utiliza un modelo  $\kappa$ - $\epsilon$  de ecuaciones para la fase continua, y se adopta la viscosidad de turbulencia para los cálculos de la fase dispersa. Así, la ecuación de energía cinética de turbulencia de la fase continua es:

$$\frac{\partial(\alpha_c k_c)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_c U_c k_c) - \nabla^2(\sigma_k v_{c,eff} k_c) = \alpha_c G - \alpha_c \epsilon_c \quad (16)$$

Donde el término  $G$  es calculado por medio de:

$$G = 2v_{c,t} [\nabla U_c \cdot \text{dev}(\nabla U_c + \nabla^T U_c)] \quad (17)$$

La tasa de disipación de turbulencia es calculada con la ecuación de transporte:

$$\frac{\partial(\alpha_c \epsilon_c)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_c U_c \epsilon_c) - \nabla^2(\sigma_\epsilon v_{c,eff} \epsilon_c) = C_1 \alpha_c G \frac{\epsilon_c}{\kappa_c} - C_2 \alpha_c \frac{\epsilon_c^2}{\kappa_c} \quad (18)$$

Por fin, la viscosidad de turbulencia de la fase continua es obtenida por medio de la **Ecuación 7**, mientras la de la fase dispersa es estimada de la siguiente manera:

$$v_{d,t} = C_t^2 v_{c,t} \quad (19)$$

Donde el coeficiente  $C_t$  es una de las constantes del modelo de turbulencia.

**Tabla 1.** Coeficientes del modelo de turbulencia k- $\epsilon$ .

$C_M$	$C_1$	$C_2$	$\sigma_c$	$\sigma_k$
0,09	1,44	1,92	1,0	1,3

### 3. SELECCIÓN DEL MODELO

Como se ha explicado en el capítulo anterior, el conocimiento de la dinámica de flujos bifásicos aún es muy limitado. La necesidad de comprender e interpretar el comportamiento e interacción de las variables de este tipo de flujo llevaron, en las últimas décadas, a la pesquisa activa de modelos basados en herramientas de Dinámica de Fluidos Computacional, CFD (Sanyal et al., 1999). Esta técnica es empleada para clarificar o revelar detalladamente y físicamente determinados flujos, donde los pequeños detalles no podrían ser visualizados por análisis experimental. Para este trabajo, a fin de representar el comportamiento bifásico gas-líquido de la aplicación deseada, se utilizó el código CFD denominado *OpenFOAM*.

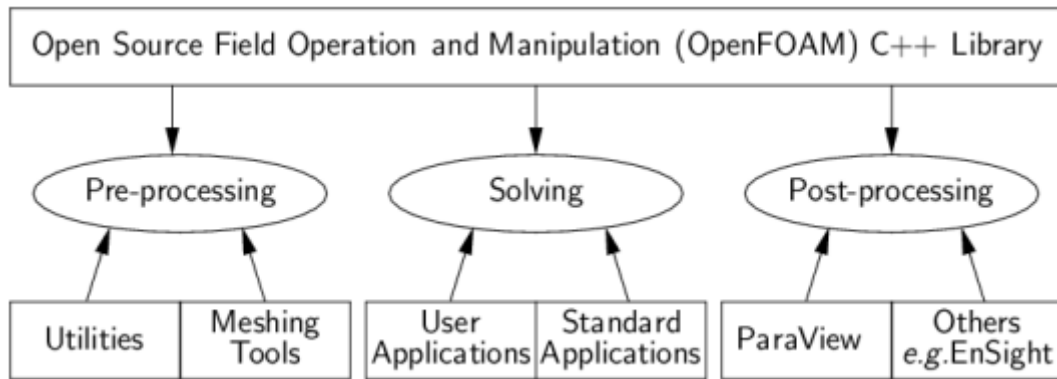
En este capítulo se describe la estructura del código usado, *OpenFOAM*. Luego, se hace una breve introducción a dos *solvers* que se ajustan al fenómeno que se quiere analizar en el presente estudio, el *bubbleFoam* y el *twoPhaseEulerFoam*. Asimismo, se aplica estos *solvers* a un caso de ejemplo para verificar su comportamiento y poder elegir el que mejor se adaptaría al caso de interés.

#### 3.1 OPENFOAM

*OpenFOAM* (*Open Source Field Operation and Manipulation*) es un *software* de simulación numérica que utiliza lenguaje C++ para el desarrollo de solucionadores personalizados y para el pre y pos procesamiento de utilidades solucionadoras de problemas con ecuaciones diferenciales, incluyendo los problemas de Fluido Dinámica Computacional. La Fundación *OpenFOAM*, titular de los derechos de autor, licencia *OpenFOAM* como una herramienta abierta y de código libre, según la *General Public License*, GPL (Fuente: Fundación *OpenFOAM*).

Se trata de un código muy ventajoso, pues no tiene coste de licencia, dispone de una sencilla sintaxis de ecuaciones diferenciales comparado con otros *softwares*, y cuenta

con una amplia gama de aplicaciones y modelos listos para utilizar. También dispone de una buena estructura de resolución de problemas, que cuenta con herramientas de pre y pos procesamiento (**Figura 7**).



**Figura 7.** Descripción de la estructura de funcionamiento del OpenFOAM  
(OpenFOAM, User Guide, 2013).

Inicialmente, en el pre-procesamiento, se debe desarrollar la malla de acuerdo con la geometría del caso, a fin de definir el volumen de control, y se debe definir también las condiciones de contorno. A continuación, se define las condiciones iniciales y las propiedades físicas implicadas en el modelo, como las propiedades de transporte y de turbulencia. Después, se deben ajustar las condiciones de cálculo y ejecutar el *solver*.

En *OpenFOAM* se denomina *solver* el algoritmo a seguir para la correcta modelización del fenómeno. Por lo tanto, el *solver* incluye tanto las ecuaciones a resolver, como la estrategia a seguir para resolverlas. En *OpenFOAM* existen muchos *solvers* y el usuario puede desarrollar nuevos *solvers* a partir de los que ya existen. Los *solvers* patrones contemplados por el *OpenFOAM* están divididos en 13 categorías denominadas: *Basic*; *Incompressible Flow*; *Compressible Flow*; *Multiphase Flow*; *Direct Numerical Simulation (DNS)*; *Combustion*; *Heat transfer and buoyancy-driven flows*; *Particle-tracking flows*; *Molecular dynamics methods*; *Direct simulation Monte Carlo methods*; *Electromagnetics*; *Stress analysis of solids*; y *Finance*. Para cada uno de los *solvers* existentes constan casos de ejemplo o tutoriales. Por fin, el pos procesamiento y análisis de resultados son realizados preferencialmente con el aplicativo *paraView*.

## 3.2 COMPARATIVA

A fin de aplicar el código *OpenFOAM* para las simulaciones deseadas, fue necesario, en primer lugar, elegir el solver que tuviese el modelo más adecuado para representar el transporte de burbujas de helio en el metal líquido. Como se trata de un sistema bifásico gas-liquido, fue elegido la categoría *Multiphase Flow* y dentro de esta categoría se escogieron inicialmente dos solvers muy parecidos: *bubbleFoam* y *twoPhaseEulerFoam*. Los dos son definidos como *solvers* utilizados para solucionar problemas de fluido dinámica en sistemas bifásicos de dos fluidos incompresibles, donde una de las fases está dispersa. Además, ambos siguen el enfoque Euler-Euler, pues es un método más sencillo; el modelo de turbulencia k-epsilon; y tienen en cuenta las fuerzas de drag, lift y virtual mass.

Para ambos los *solvers*, las ecuaciones básicas de conservación de masa y de momento son las mismas. Así como las ecuaciones de turbulencia y contribuciones de las fuerzas de drag, lift y virtual mass (**Ecuación 3 – 19**).

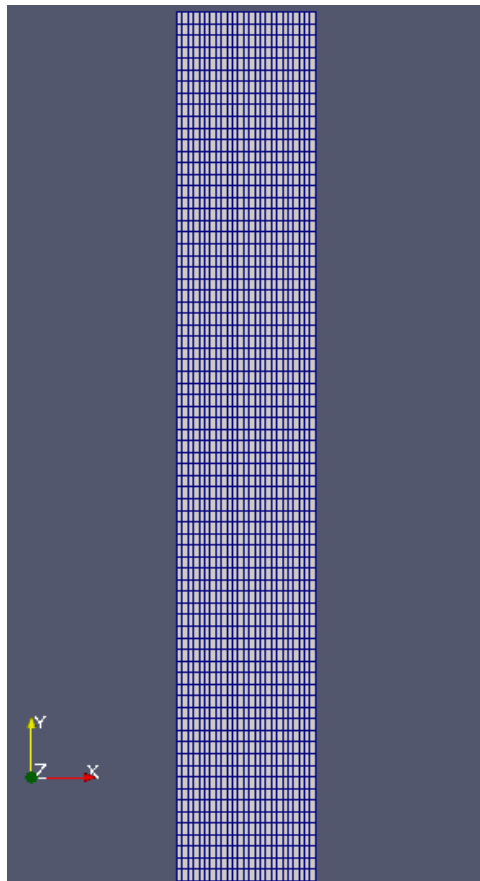
Por otro lado, el *twoPhaseEulerFoam* es una forma mejorada del *bubbleFoam*, pues también puede ser utilizado para flujos granulares y tiene diversas opciones diferentes de modelos de cálculo para la fuerza de *drag*. Otra ventaja importante del *twoPhaseEulerFoam*, es que en su código se puede elegir que fase sufre el arrastre, si solo una de las dos o ambas. Si solo la fase dispersa sufre el arrastre, lo que es interesante para la aplicación de este trabajo, no se tiene en cuenta el diámetro de la fase continua. Esto es muy importante, ya que no hay un método concreto para su estimación.

Teniendo en cuenta estas ventajas, el *twoPhaseEulerFoam* parece ser más interesante para la finalidad de este trabajo. Para confirmar que los cálculos realizados por estos dos *solvers* son de hecho los mismos, o muy parecidos, un mismo tutorial del *OpenFOAM* fue ejecutado para ambos y los resultados fueron comparados a continuación.

### 3.2.1 TUTORIAL BUBBLECOLUMN

El tutorial *BubbleColumn* es el caso de una columna de agua de 1 metro de altura donde inicialmente solo hay agua y, a partir de un cierto instante, hay la inyección de aire por toda su base (*inlet*), con una fracción de volumen de 0,5. El aire sale por el plano superior (*outlet*). En este ejemplo, el agua es la fase continua y el aire la fase dispersa.

La columna tiene dimensiones de 0,15 x 1 x 0,1 metros y la malla tiene 25 celdas en la dirección x, 75 en y, y 1 en z (**Figura 8**). Los límites del volumen de control son: *inlet*, *outlet*, *walls* y *defaultFaces*. La malla es gruesa y el diámetro de las burbujas es muy pequeño, de 0,003 m, y por tanto no es posible ver las burbujas perfectamente, solo algunos aglomerados formados por la fase dispersa. Para los dos *solvers*, se simularon 20 segundos con un *timeStep* de 0,002.



**Figura 8.** La columna de 0.15x1x0.1 metros con una malla con (25 75 1) celdas.



### 3.2.2 CONDICIONES INICIALES Y DE CONTORNO

Para el *bubbleFoam* y *twoPhaseEulerFoam*, las condiciones iniciales determinadas en la carpeta del instante inicial deben ser para las variables: alpha, epsilon, k, p, Ua y Ub. Para el tutorial *BubbleColumn*, en el instante inicial empiezan a entrar burbujas de aire con alpha de 0,5 y velocidad de 0,1 m/s en la columna llena de agua.

**Tabla 2.** Condiciones iniciales determinadas para el tutorial *bubbleColumn*.

Variables	InternalField	Inlet	Outlet (InletOutlet)	Walls	defaultFaces
alpha	Uniform 0	Uniform 0.5	Uniform 1	zeroGradient	Empty
epsilon	Uniform 0.1	Uniform 0.1	Uniform 0.1	zeroGradient	Empty
k	Uniform 1e-8	Uniform 1e-8	Uniform 1e-8	zeroGradient	Empty
p	Uniform 0	zeroGradient	Uniform 0*	zeroGradient	Empty
Ua	Uniform (0 0 0)	Uniform (0 0.1 0)	Uniform (0 0 0)	Uniform (0 0 0)	Empty
Ub	Uniform (0 0 0)	Uniform (0 0 0)	Uniform (0 0 0)	Uniform (0 0 0)	Empty

\*No es tipo inletOutlet, pero sí de fixedValue.

### 3.2.3 PROPIEDADES FÍSICAS Y MODELOS

Para el estudio de este tutorial, no se tuvo en cuenta los efectos de turbulencia, ni de partícula. Se utilizó el modelo de fuerza de *drag* (modelo de *Schiller Naumann* para *twoPhaseEulerFoam*) y las propiedades físicas del agua y del aire en condiciones normales (densidad, viscosidad, diámetro y coeficientes de *virtual mass* y *lift*).

### 3.2.4 RESULTADOS

Los resultados de las dos simulaciones ejecutadas con los dos *solvers* fueron analizados y comparados. A continuación se muestran algunos de estos resultados:

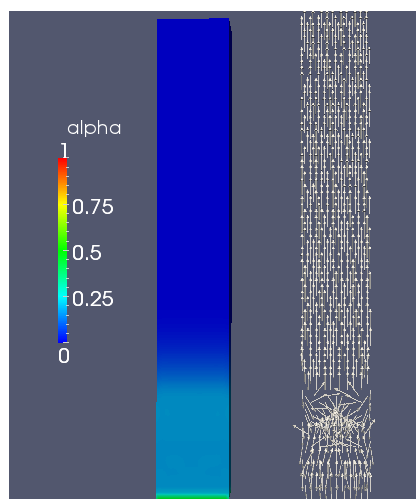
### 3.2.4.1 BubbleFoam

#### Tiempo 0

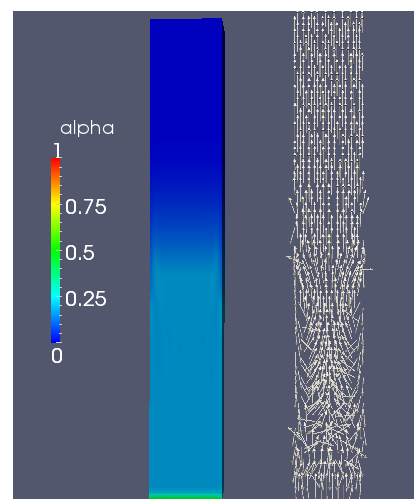
En el tiempo 0, solo hay agua dentro de la columna y se empieza a inyectar aire en el fondo (*inlet*).

#### Tiempos 1s-4s

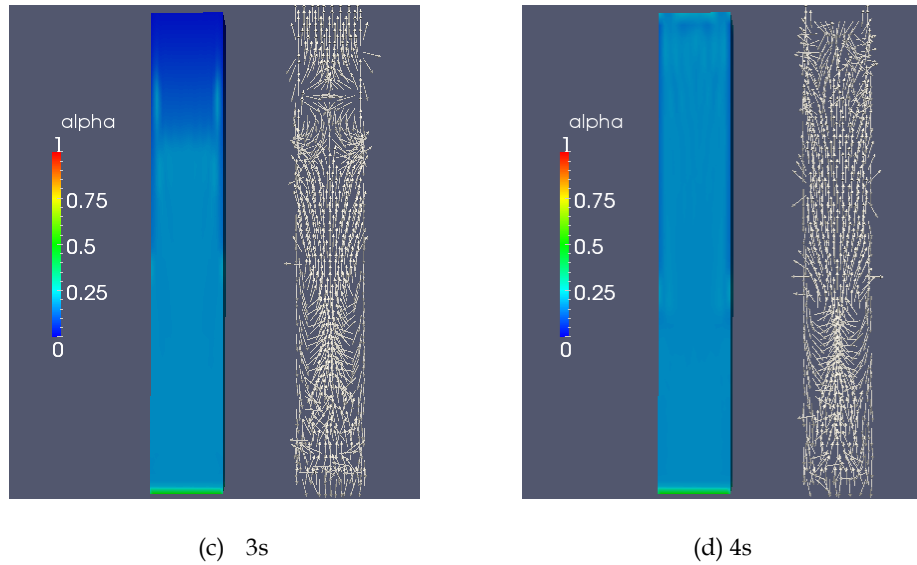
En este intervalo de tiempo, ya se ha inyectado aire y por lo tanto la fracción de volumen de la fase dispersa comienza a aumentar por toda la columna, a partir de la parte inferior hacia la parte superior, en un flujo homogéneo. A medida que el tiempo avanza y que se inyecta más aire, es posible observar la formación de algunos vórtices cerca de las paredes de la columna. Esto ocurre puesto que el aire, al tener un flujo ascendente en el centro de la columna, fuerza el movimiento del líquido contra las paredes. Luego, la parte continua es empujada hacia la parte superior (*outlet*). Debido a la diferencia de densidad entre el aire y el agua, el agua se queda dentro del sistema de estudio mientras que el aire sale por la parte superior, por esto, se observa la formación de vórtices en esta región.



(a) 1s



(b) 2s

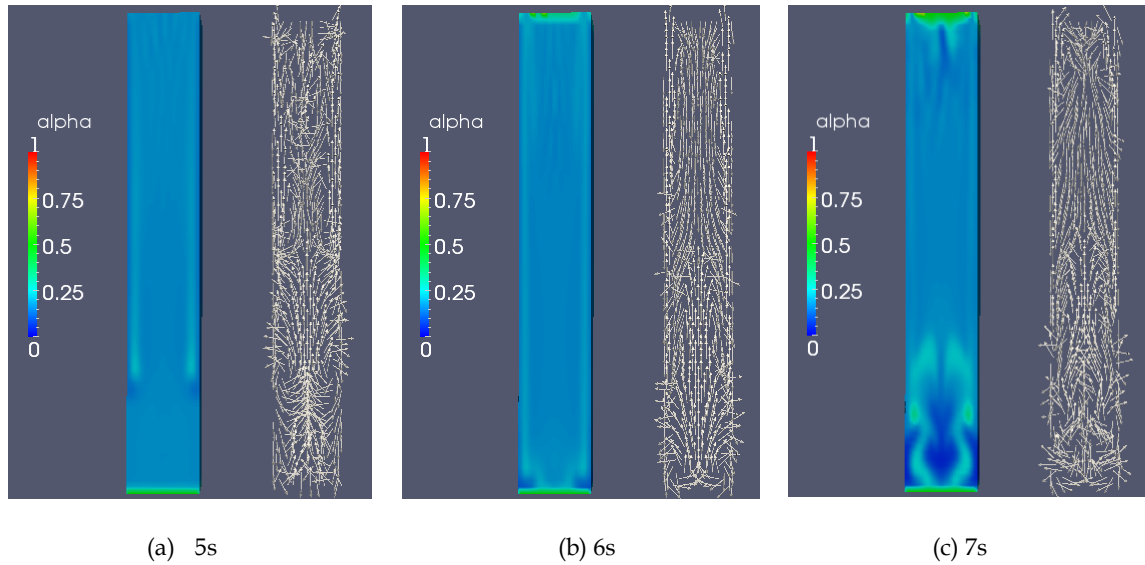


**Figura 9.** Evolución de la fracción de volumen de fase dispersa y de la velocidad de la fase continua.

### Tiempos 5s-7s

Luego, después de que el líquido llega hasta la parte superior, se genera un movimiento más intenso de la fase continua por toda la columna, que acaba por desplazar los vórtices formados en la parte inferior de la columna hacia la base, cerca del *inlet*. Esto puede ser confirmado observando el comportamiento del  $\alpha$  en los instantes 5 y 6s, pues la región de fracción de volumen más elevada, donde estaban los vórtices, presenta un desplazamiento hacia la parte inferior.

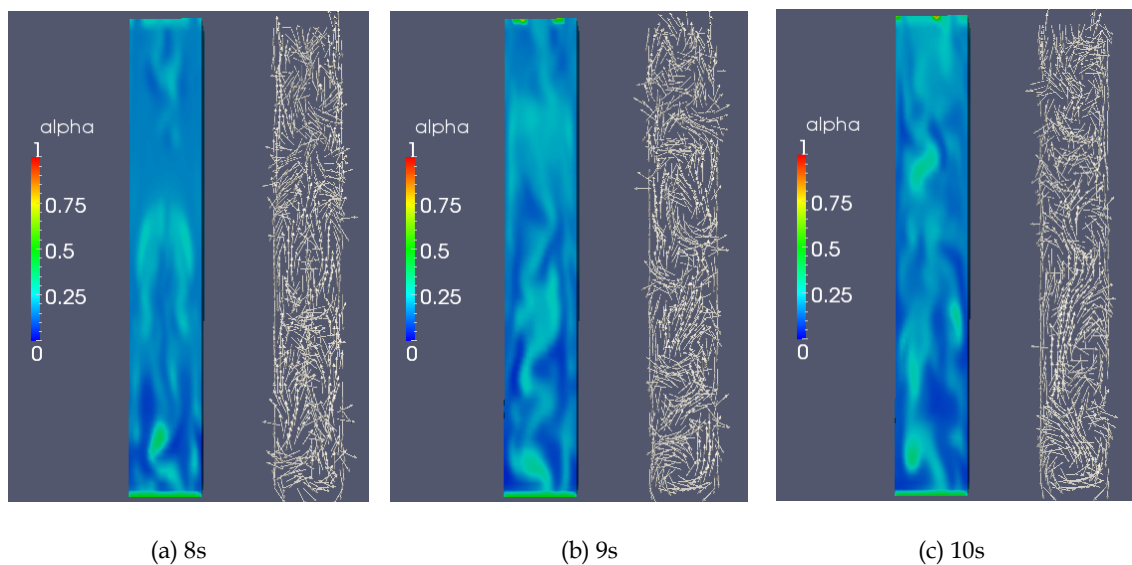
En los tiempos de 5 y 6s, comparado con los segundos anteriores, se observa también el aumento de la concentración de aire a lo largo de toda la columna, pues en 5s el comportamiento del  $\alpha$  en las paredes es mayor y en el tiempo de 6s también se puede observar un cambio en el  $\alpha$  del *outlet*, lo que indica que hay más aire saliendo. En el instante de 7s, es posible observar que la fase dispersa empieza a cambiar de comportamiento y comienza a presentar un flujo heterogéneo en la base de la columna.



**Figura 10.** Evolución de la fracción de volumen de fase dispersa y de la velocidad de la fase continua.

### Tiempos 8s-10s

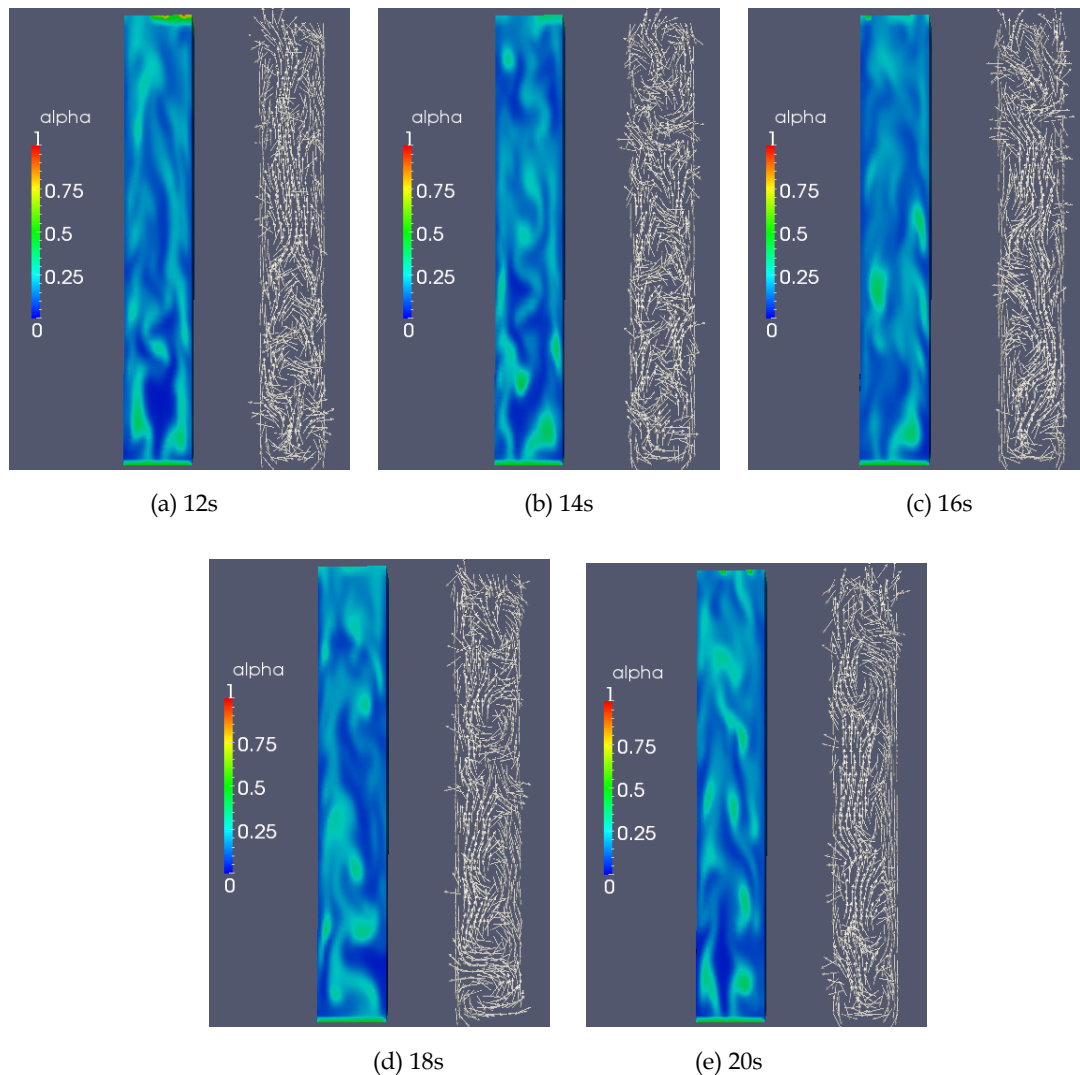
Por lo tanto, como se ha dicho anteriormente, en el instante de 7s es posible observar que se empieza el flujo de burbujas heterogéneo. En los instantes siguientes de 8s-10s, este comportamiento se extiende hacia la parte superior de la columna, como se puede observar en la **Figura 11**.



**Figura 11.** Evolución de la fracción de volumen de fase dispersa y de la velocidad de la fase continua.

Tiempos 12s-20s

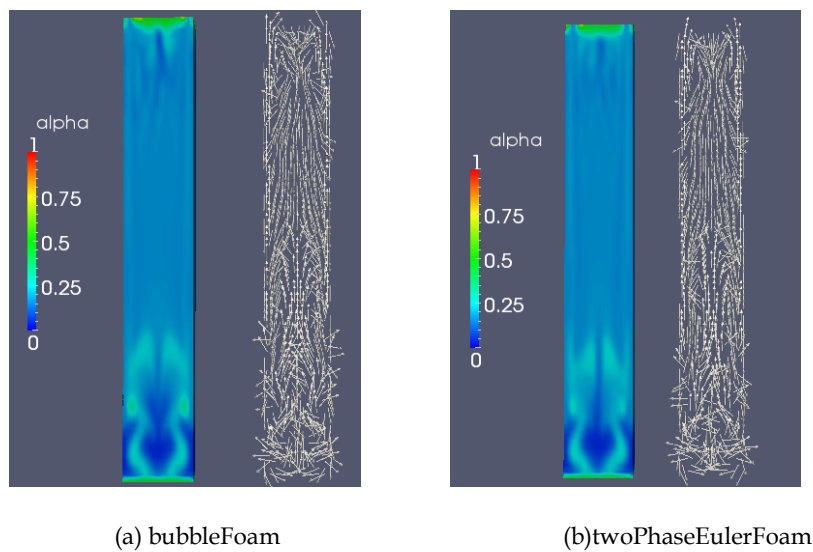
El comportamiento del flujo de burbujas heterogéneo continua hasta llegar al instante final de la simulación, 20s. El flujo de aire observado se caracteriza como un flujo heterogéneo *churn-turbulent*, pues hay un flujo principal de burbujas ascendente en el centro de la columna y un flujo descendente de líquido y pequeñas burbujas en las paredes laterales. Además, como en este tutorial las burbujas no forman una pluma sinuosa bien clara en el centro y están muy aglomeradas, también se puede decir que se trata de un comportamiento transitorio entre *churn-turbulent* y *slug* (**Figura 5**). La existencia de este comportamiento transitorio fue comprobado en diversos estudios como de Deckwer et al. (1980) y Kantarci et al. (2005).



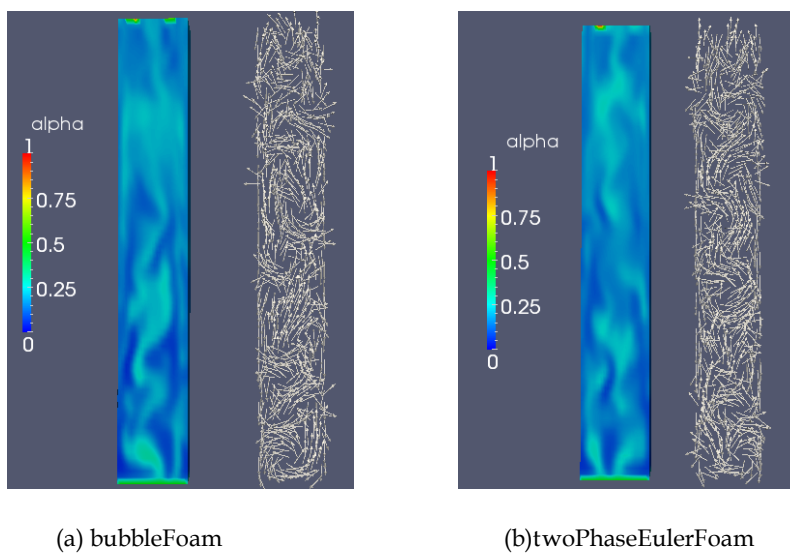
**Figura 12.** Evolución de la fracción de volumen de fase dispersa y de la velocidad de la fase continua

### 3.2.4.2 TwoPhaseEulerFoam

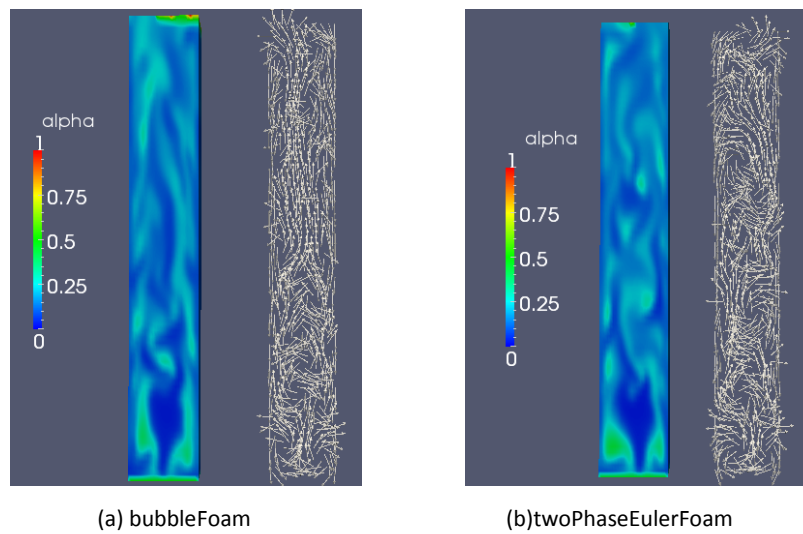
El mismo tutorial *BubbleColumn*, simulado con el solver *twoPhaseEulerFoam*, obtuvo un comportamiento de flujo muy parecido al obtenido con el solver *bubbleFoam*, presentado anteriormente. En general, los resultados fueron prácticamente idénticos para todos los tiempos. Abajo, hay algunos instantes donde es posible observar que las diferencias entre los resultados son casi imperceptibles.



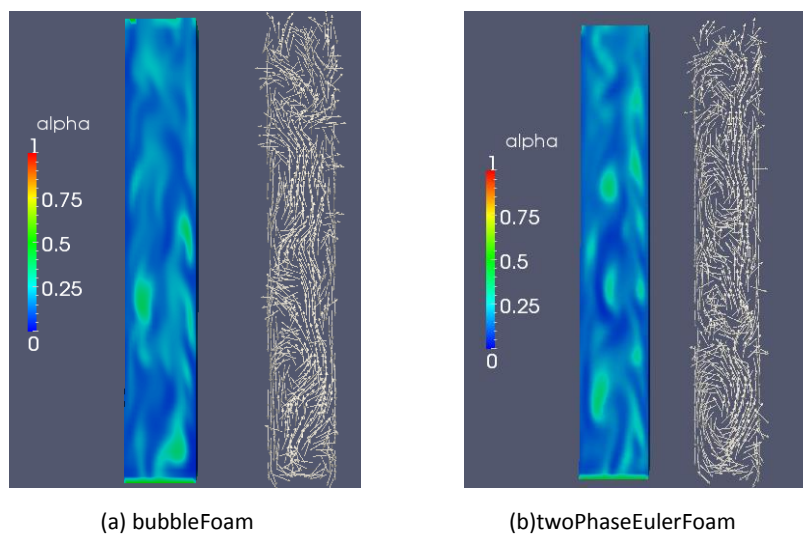
**Figura 13.**  $\alpha$  del gas y velocidad del líquido en el tiempo 7s.



**Figura 14.**  $\alpha$  del gas y velocidad del líquido en el tiempo 9s.

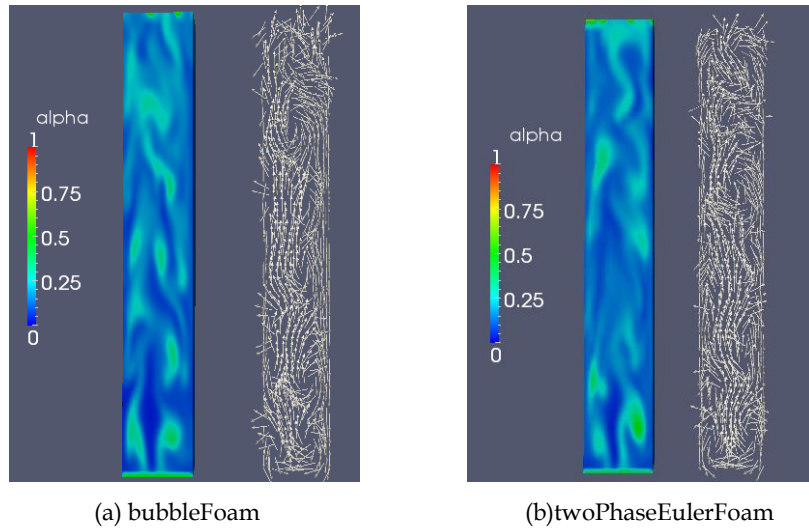


**Figura 15.**  $\alpha$  del gas y velocidad del líquido en el tiempo 12s.



**Figura 16.**  $\alpha$  del gas y velocidad del líquido en el tiempo 16s.





**Figura 17.**  $\alpha$  del gas y velocidad del líquido en el tiempo 20s.

### 3.3 CONCLUSIONES

A fin de utilizar el código *OpenFOAM* para la aplicación deseada, fue imprescindible elegir el *solver* que tuviese el modelo más adecuado para representar el transporte de burbujas en el metal líquido. Para esto, se eligieron inicialmente dos *solvers*, *bubbleFoam* y *twoPhaseEulerFoam*, con modelos muy parecidos que se ajustaban bien al fenómeno de interés. Los dos fueron aplicados a un caso de estudio conocido, uno de los tutoriales de la biblioteca *OpenFOAM*, para que se pudiese verificar su comportamiento, lo que permitiría comparar las soluciones de los *solvers* y elegir el que mejor se adaptaría al caso de interés.

Puesto que los resultados alcanzados fueron muy parecidos, es posible confirmar que los *solvers* de *bubbleFoam* y de *twoPhaseEulerFoam* son prácticamente iguales. La diferencia es que el *twoPhaseEulerFoam* es una versión mejorada del *bubbleFoam*, ya que puede ser aplicado para una mayor variedad de casos de flujos bifásicos y tiene más opciones de métodos de cálculo para la fuerza de arrastre. Debido a estas ventajas, se eligió el *twoPhaseEulerFoam* como el *solver* para la aplicación de este trabajo.

En el Anexo A se detalla el *solver twoPhaseEulerFoam*, incluyendo las hipótesis asumidas, las ecuaciones implementadas y la estructura de archivos para su utilización.

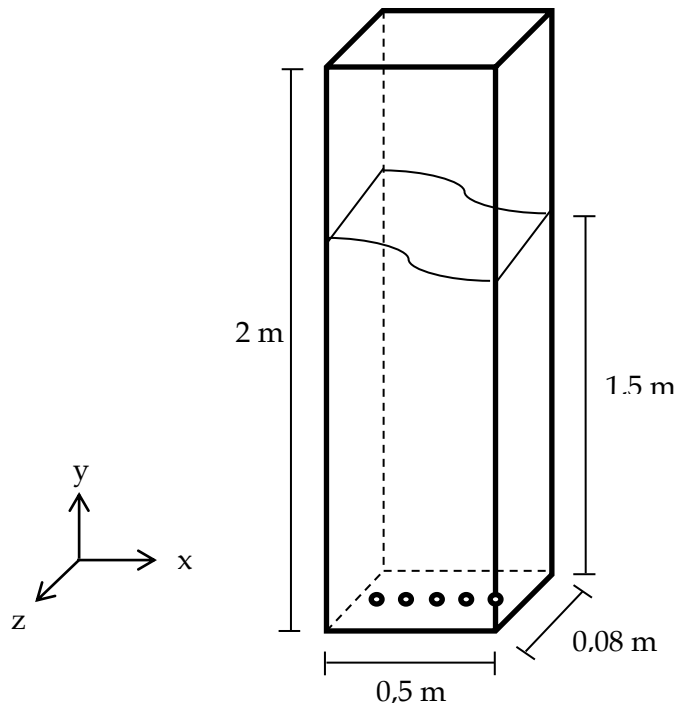


## 4. VALIDACIÓN DEL MODELO

Para validar el código y comprobar que el *solver twoPhaseEulerFoam* puede ser utilizado para reproducir casos de sistemas bifásicos reales, se ha usado para reproducir un caso experimental conocido de *bubble column* parcialmente airada. El caso seleccionado es el de Becker et al. (1994), que también fue utilizado por inúmeros otros autores para validar diferentes modelos computacionales.

### 4.1 EXPERIMENTO

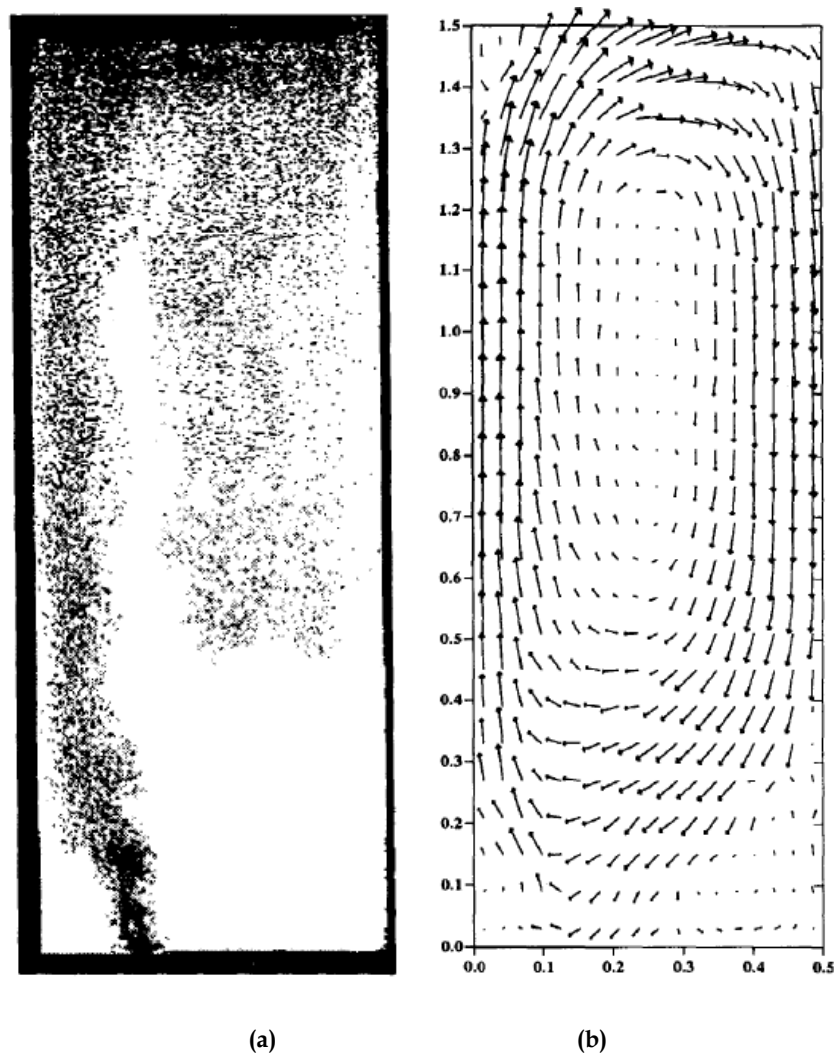
El experimento es muy sencillo, se trata de una columna de 2m de altura, 0,5m de ancho y 0,08m de profundidad, donde inicialmente el líquido, agua, está al nivel de 1,5m en la columna (**Figura 18**). El aire, que es la fase dispersa, es inyectado por medio de un distribuidor de aire (*sparger*) de 0,04m de diámetro, localizado en la base de la columna, centrado en el eje z y situado a 0,15m de la pared izquierda. Los testes fueron realizados para dos caudales diferentes de 8L/min ( $w_G = 3,3$  mm/s) y 1,6L/min ( $w_G = 0,66$  mm/s).



**Figura 18.** Dimensiones de la columna utilizada en el experimento.

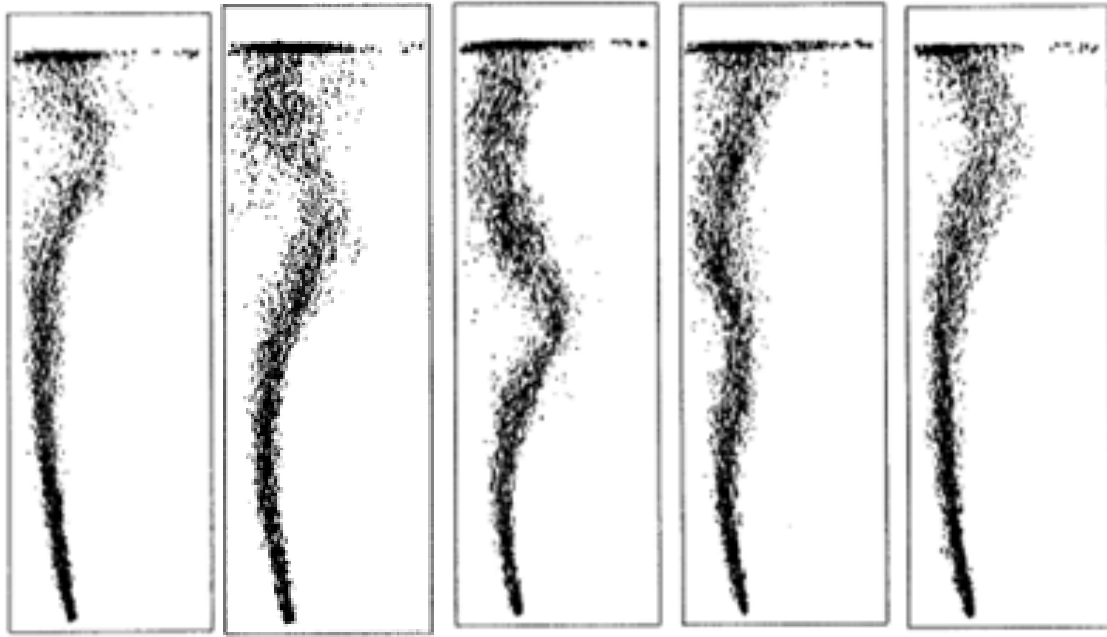
Como discutido en el capítulo de flujos multifásicos, las columnas de burbujas son equipos muy importantes para la industria química y son caracterizados por una instalación sencilla y una alta eficiencia. La gran desventaja de estos aparatos es que aún no se conoce mucho sobre la hidrodinámica de sistemas bifásicos gas-liquido. Se trata de un sistema de flujo muy complejo que puede ser influenciado por inúmeros factores, como por ejemplo la localización del distribuidor de aire, como en el caso de estudio de Becker et al. (1994).

El primero experimento fue realizado para una velocidad de entrada de aire de 8L/min. Se observó que había la formación de una pluma de aire que se pegaba a la pared izquierda, por cuenta de la asimetría en la ubicación del *sparger*. Esto producía un vórtice dextrógiro que ocupaba toda la altura de la columna. El flujo llegó a condiciones esencialmente estacionarias (**Figura 19**).



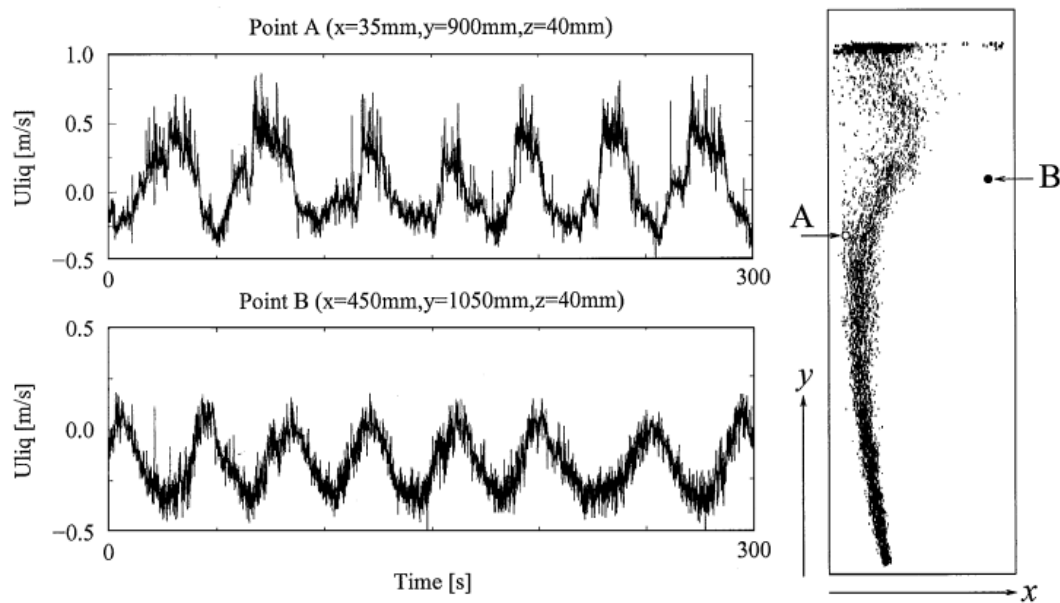
**Figura 19.** Velocidad Alta, caudal de gas de 8 l/min. a) Fotografía de la columna y b) medidas de la velocidad del líquido (Becker et al., 1994).

En un segundo experimento, el caudal volumétrico fue disminuido a 1,6 L/min y el comportamiento del flujo bifásico se cambió drásticamente. Con la velocidad baja se formaron mucho más vórtices a lo largo de la columna. La parte inferior de la pluma se quedó estable cerca de la pared izquierda y la parte superior obtuvo una forma más serpenteante, que se movía de acuerdo con los vórtices de la fase líquida que subían y bajaban constantemente.



**Figura 20.** Velocidad baja, caudal de gas de 1,6 l/min. Fotografía de la columna en intervalos de tiempo de  $\Delta t=10s$  (Sokolichin et al., 1999).

Durante el experimento de la velocidad baja, el parámetro hidrodinámico local de velocidad del líquido fue mensurado por medio de la técnica de LDA (Anemómetro de Laser Doppler) para permitir la comparación con las simulaciones. Algunos años después de la publicación del experimento, Sokolichin et al. (1999), también autor del artículo del experimento original, publicó las medidas para la velocidad vertical del líquido en dos puntos de la columna de Becker et al. (1994). Uno ubicado en la región de la fase dispersa, punto A, y otro sin la fase dispersa, punto B. En la figura siguiente, se puede ver que estos resultados mostraron la presencia de un movimiento medio periódico aproximadamente a cada 41s. Por encima del comportamiento medio periódico se observa innumerables oscilaciones, las cuales parecen indicar un cierto grado de turbulencia.



**Figura 21.** Velocidad baja, caudal de gas de 1,6 l/min. Medura de velocidad del líquido en el punto A, región con burbujas y B, zona libre de burbujas (Sokolichin et al., 1999).

## 4.2 ESTUDIOS PREVIOS

Los artículos publicados que reproducen el caso de Becker et al. (1994) presentan los más diferenciados modelos computacionales que llevaron a importantes conclusiones con respecto a la simulación y modelización de este tipo de flujo de burbujas.

En primer lugar están los estudios numéricos realizados por el propio autor del experimento. La simulación numérica de Becker et al. (1994) fue realizada con una malla de 18x25, un modelo Euler-Euler, con velocidad de slip constante (entrada de 0.2 m/s de aire), teniendo en cuenta las clases de burbujas de diferentes tamaños, y depreciando las fuerzas de *lift* y *virtual mass*. Para las simulaciones de la velocidad alta, se empezó utilizando un régimen laminar. Con esto, sí que se llegó al estacionario, pero no se formó ningún de los vórtices en los rincones, como se obtuvo en el resultado promediado de las medidas del experimento. Aplicando el modelo de turbulencia k- $\epsilon$ , tampoco se consiguió, pues la viscosidad turbulenta del líquido fue aumentada de un factor de 20000, lo que amortiguó todos los pequeños vórtices esperados. La solución

encontrada por el autor para reproducir bien los resultados experimentales, fue utilizar el modelo laminar con una viscosidad de turbulencia del líquido aumentada por un factor constante de 100 para todo el dominio de la columna.

Las simulaciones de Becker et al. (1994) para la velocidad baja fueron realizadas teniendo en cuenta un régimen de modelo laminar. Con una malla de 18x25, se llegó al estacionario. Mejorando un poco la malla para 38x50, el flujo pasó a ser transitorio y fue posible observar el comportamiento serpenteante de la pluma como en el experimento.

Por otro lado, Delnoij et al. (1997) reprodujo el experimento de Becker et al. (1994) con un enfoque Euler-Lagrangian en geometría 2D, despreciando los efectos de la turbulencia. Tuvo en cuenta fuerzas de lift, drag y virtual mass, así como interacciones burbuja-burbuja por medio de estimación con el modelo de Hoomans, et al (1996). Los resultados mostraron que su modelo laminar para una determinada malla (50x100) obtiene buenas soluciones, pero cualitativamente puede presentar un comportamiento diferente de la pluma, como por ejemplo le ocurrió que para la velocidad baja la pluma se alejaba de la pared izquierda, lo que claramente es diferente del experimento. En contrapartida, los valores estimados para el punto A (**Figura 21**) fueron muy parecidos con los medidos por Becker et al. (1994), demostrando consistencia de las soluciones cuantitativas.

Mudde et al. (1999), reprodujo el caso solo para la velocidad baja con simulaciones en régimen transitorio utilizando el modelo k- $\epsilon$  y método Euler-Euler, teniendo en cuenta fuerzas de *drag* y *virtual mass*. El autor alcanzó un régimen estacionario para geometría 2D, así como Sommerfeld et al. (1997), debido al aumento exacerbado de la viscosidad efectiva del líquido, y obtuve resultados más parecidos con el experimento cuando aplicó una geometría 3D. El efecto de la fuerza de *virtual mass* también fue estudiado y se concluyó que se trata de una contribución muy importante que acerca las simulaciones de los resultados experimentales.

Sokolinchin et al. (1999), uno de los autores del artículo del experimento, por medio de un modelo Euler-Euler con velocidad de slip constante (0,2m/s), estudió la influencia de la malla en un modelo laminar 2D, y la influencia del modelo de turbulencia en geometrías 2D y 3D. Lo que se concluyó fue que la representación de un régimen

turbulento, como el experimento de Becker et al. (1994), con un modelo laminar 2D depende fuertemente de la resolución del espacio utilizado, es decir, cuanto más refinada la malla, más vórtices son solucionados, lo que puede permitir la obtención de buenos resultados, pero con una malla que sea suficientemente fina.

Cuanto a la utilización del modelo de turbulencia, lo que se pudo concluir fue que en geometrías 2D la turbulencia sobreestima la viscosidad efectiva llevando a un sistema muy simplificado debido a las limitaciones de profundidad y simplificaciones de una geometría 2D. En contrapartida, como en una geometría 3D no se tiene en cuenta estas simplificaciones, los resultados son más reales y consistentes con el experimento.

Debido a la gran disponibilidad de diferentes resultados de reproducciones del experimento de Becker et al. (1994), para la validación del modelo utilizado en este trabajo, se ha fijado en las simulaciones y resultados obtenidos por los propios autores del experimento, Becker et al. (1994) y Sokolichin et al. (1999).

## 4.3 ESTUDIO CON TWOPHASEEULERFOAM

### 4.3.1 DEFINICIÓN DEL CASO

La geometría considerada reproduce fielmente el experimento, aunque presente algunas simplificaciones según si la simulación es 2D o 3D. Para las simulaciones en 2D, se utilizó un volumen de control de altura de 1,5m, que corresponde a la región ocupada por el agua. Por otro lado, para las simulaciones en 3D, se utilizó tanto el volumen de control de altura 1,5m como el volumen total de 2m, para comprobar la influencia de la condición de contorno en la salida (outlet). Quanto a la región de entrada del aire, el *sparger* fue representado en 2D como una región rectangular de 0,04x0,08m, mientras en 3D, tuvo una representación más aproximada de la realidad, con un área circular de diámetro igual al original de 0,04m ( $D_{\text{sparger}}$ ).

Por cuenta de estas aproximaciones realizadas para representar el *sparger*, una de las dificultades de la reproducción fue la determinación de los valores de entrada del aire.

Por lo tanto, la velocidad y la fracción de volumen del aire fueron estimadas por medio de cálculos. Al principio, para la columna 3D, fue considerada que la fracción de volumen en el distribuidor era de *alpha* igual a 1, y luego la velocidad de entrada fue calculada dividiendo el caudal por el área del *sparger* y el *alpha*:

$$U = \frac{\text{caudal}}{\alpha_{3D} \cdot A_{\text{circular}3D}} = \frac{\text{caudal}}{1 \cdot \pi \cdot D_{\text{sparger}}^2} \quad (20)$$

Para la columna 2D, como el área del *sparger* se amplía, pues cambia de circular para rectangular, la velocidad de entrada es mantenida constante (se mantiene el Reynolds) y se calcula el *alpha* para la nueva área:

$$\alpha_{2D} = \frac{\text{caudal}}{U \cdot A_{\text{rectangular}2D}} = \frac{\text{caudal}}{U \cdot (0,04 \times 0,08)} \quad (21)$$

Posteriormente, los resultados obtenidos fueron utilizados como condiciones de contorno de entrada del aire en las simulaciones con el *twoPhaseEulerFoam*. Los valores calculados con las ecuaciones anteriores se presentan en la tabla siguiente.

**Tabla 3.** Parámetros calculados y utilizados para la simulación con el *twoPhaseEulerFoam*.

Caudal Alto	Caudal Bajo
Velocidad (m/s) = 0,106	Velocidad (m/s) = 0,021
$\alpha_{2D} = 0,39$	$\alpha_{2D} = 0,39$
$\alpha_{3D} = 1$	$\alpha_{3D} = 1$

Con estos valores, se obtuvo un Reynolds (**Ecuación 22**) en el *sparger* de 292 para la velocidad alta y de 58 para la velocidad baja.



$$Re = \frac{U \cdot D_{sparger}}{\nu} \quad (22)$$

Para las burbujas de aire inyectadas se consideró un diámetro constante de 0,003m, valor estimado cualitativamente así como Mudde et al. (1999). Las propiedades de viscosidad y densidad de los fluidos utilizados fueron las referentes a una temperatura de 25°C. Las constantes de virtual *mass* y *lift* fueron fijadas en valores de 0,5 y 0,53, respectivamente, mientras la fuerza y constante de *drag* fueron estimadas de acuerdo con el modelo *WenYu* de la biblioteca *OpenFOAM*.

A continuación, para las superficies del volumen de control, el área referente al *sparger* fue denominada de *inlet*, la parte inferior de la columna alrededor del *sparger* de *down*, la parte superior referente a la salida fue denominada de *outlet*, las paredes laterales de *walls* y las paredes de atrás y de adelante fueron denominadas *frontBack*. De esta manera, teniendo en cuenta las superficies de control citadas, las condiciones iniciales determinadas para la implementación de este caso fueron:

**Tabla 4.** Condiciones iniciales y de contorno para el caso reproducido en 2D.

Variable	InternalField	Inlet	Down	Outlet	Walls	FrontBack
alpha	Uniform 0	Uniform 0,39	Zero Gradient	InletOutlet 1	Zero Gradient	empty
epsilon	Uniform 0.1	Uniform 0.1	Zero Gradient	InletOutlet 0.1	Zero Gradient	empty
k	Uniform 1e-5	Uniform 1e-5	Zero Gradient	InletOutlet 1e-5	Zero Gradient	empty
p	Uniform 0	Buoyant Pressure 0	Buoyant Pressure 0	Uniform 0	Buoyant Pressure 0	empty
Ua	Uniform (0 0 0)	Uniform (0 U* 0)	Uniform (0 0 0)	Uniform (0 0 0)	Uniform (0 0 0)	empty
Ub	Uniform (0 0 0)	Uniform (0 0 0)	Uniform (0 0 0)	Uniform (0 0 0)	Uniform (0 0 0)	empty

\*Donde U es 0,106m/s para el caudal alto y 0,021 m/s para el bajo.

**Tabla 5.** Condiciones iniciales y de contorno para el caso reproducido en 3D.

Variable	InternalField	Inlet	Down	Outlet	Walls	FrontBack
alpha	Uniform 0	Uniform 1	Zero Gradient	Zero Gradient**	Zero Gradient	Zero Gradient
epsilon	Uniform 0.1	InletOutlet 0.1	Zero Gradient	Uniform 0.1	Zero Gradient	Zero Gradient
k	Uniform 1e-5	InletOutlet 1e-5	Zero Gradient	Uniform 1e-5	Zero Gradient	Zero Gradient
p	Uniform 0	Buoyant Pressure 0	Buoyant Pressure 0	Uniform 0	Buoyant Pressure 0	Zero Gradient
Ua	Uniform (0 0 0)	Uniform (0 U* 0)	Uniform (0 0 0)	Uniform (0 0 0)	Uniform (0 0 0)	Uniform (0 0 0)
Ub	Uniform (0 0 0)	Uniform (0 0 0)	Uniform (0 0 0)	Uniform (0 0 0)	Uniform (0 0 0)	Uniform (0 0 0)

\*Donde U es 0,106m/s para el caudal alto y 0,021 m/s para el bajo.

\*\*Para el alpha en *outlet*, se utilizó InletOutlet en vez de ZeroGradient para la geometría de altura de 2m.

#### 4.3.2 ESTRATEGIA NUMÉRICA

Para las simulaciones en 2D, se utilizaron mallas de 50x100x1 (M1), 75x150x1 (M2) y 100x225x1 (M3). Por otro lado, para las simulaciones en 3D, se utilizó una malla gruesa de 28x80x4 (M4) para las soluciones de geometría de 1,5m de altura, y una malla de 28x107x4 (M5), cuando la altura utilizada fue la de 2m. En este caso, las celdas en el eje y de la malla M4 fueron multiplicadas por un factor de 2m/1,5m, resultando en M5. La primera malla, M1, fue la misma utilizada por Delnoij et al. (1997) y por consiguiente, M2 y M3 fueron determinadas proporcionalmente a partir de M1. M4 fue establecida con una orden de magnitud parecida con una de las mallas de geometría 3D de Sokolinchin et al. (1999) y M5 fue obtenida a partir de esta última.

Tabla 6. Mallas testadas.

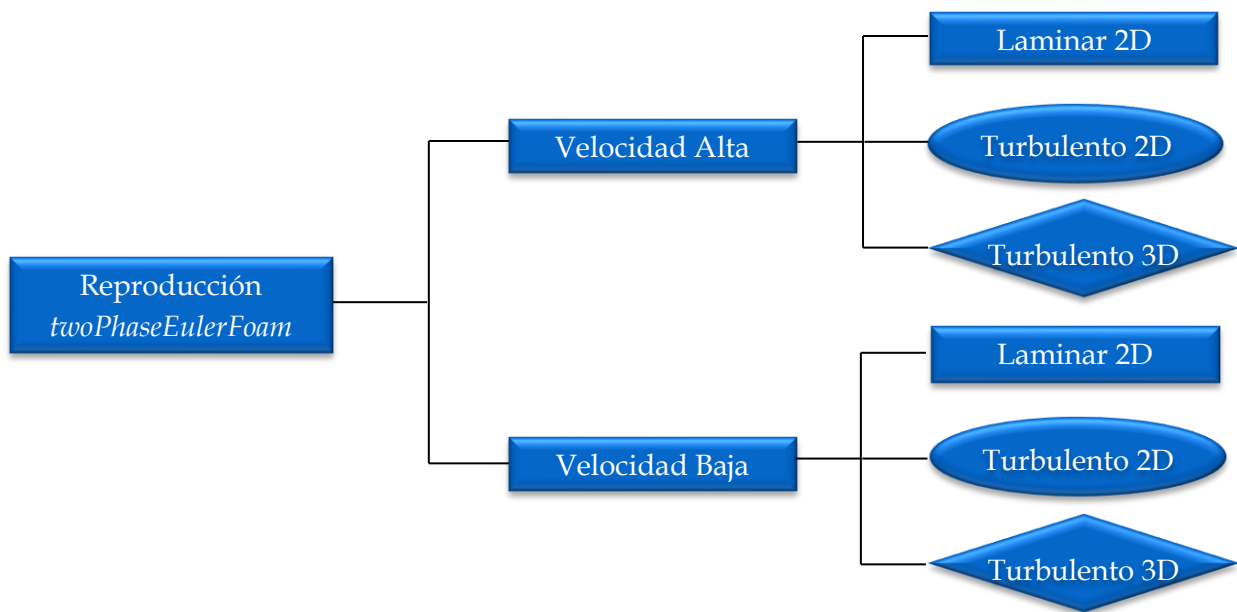
Mallas	Celdas (x y z)
M1	(50 100 1)
M2	(75 150 1)
M3	(100 225 1)
M4	(28 80 4)
M5	(28 107 4)

Con respecto a los esquemas numéricos, fue utilizado el esquema Gauss linear para todos los términos difusivos. El esquema UPWIND, que es más sencillo, fue utilizado para la convección de los términos de turbulencia, ya que estudios, como el de Sokolichin et al. (1999), probaron que la discretización con UPWIND o TVD para turbulencia obtienen resultados prácticamente idénticos. Para las reproducciones en 2D, el UPWIND también fue utilizado para la velocidad del líquido. Para todos los otros parámetros, se utilizó el esquema TVD. Los laplacianos fueron interpolados con el esquema Gauss linear corregido. La presión fue solucionada con el solver linear GAMG (*Generalised geometric-Algebraic Multi-Grid*) y la velocidad con el smoothSolver. La unión de las dos ecuaciones fue realizada con el algoritmo SIMPLE.

#### 4.3.3 RESULTADOS

Previamente, otros autores afirmaron que el experimento de Becker et al. (1994), sea para la velocidad alta o baja, es turbulento. De esta manera, para realizar los testes con el *twoPhaseEulerFoam* se tuvo en cuenta que para representar un régimen de flujo turbulento hay dos opciones: la primera es por medio de un régimen laminar, donde se utiliza las ecuaciones reales y una malla muy fina; y la segunda opción es por medio de una malla gruesa, juntamente con las ecuaciones reales y un modelo de turbulencia, como el k- $\epsilon$ .

Por esto, se aplicó un modelo laminar 2D con 3 mallas diferentes, y el turbulento con mallas gruesas en 2D y en 3D. Así, los estudios realizados con el *twoPhaseEulerFoam* para la validación del modelo pueden ser resumidos de la siguiente manera:



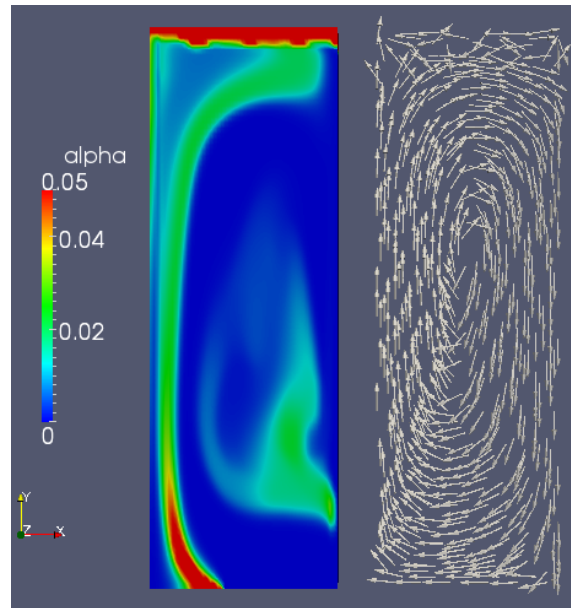
**Figura 22.** Secuencia de simulaciones realizadas con el *twoPhaseEulerFoam*.

A continuación, se exponen y comentan los resultados obtenidos.

#### 4.3.3.1 Velocidad Alta

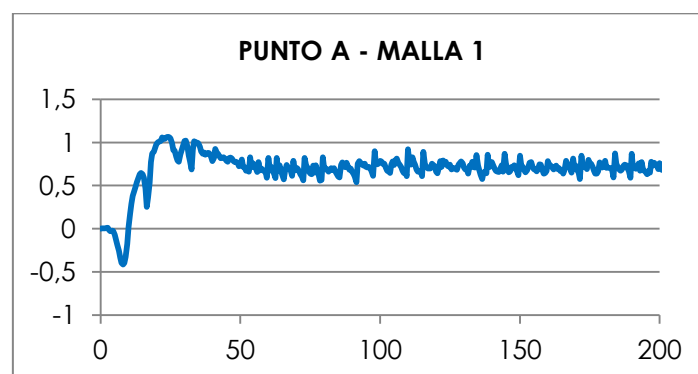
##### Laminar 2D

Cuando se realizó el cálculo laminar con la malla gruesa M1, los resultados obtenidos fueron muy similares a los de Becker et al. (1994). La solución presentó un comportamiento casi estacionario con un flujo ascendente a la izquierda y un descendente a la derecha (**Figura 23**).

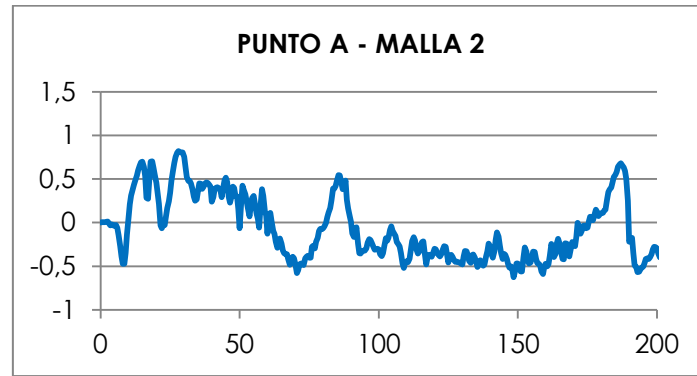


**Figura 23.** Comportamiento de la fracción de volumen del aire y de la velocidad del líquido en un determinado tiempo (M1 - Laminar 2D).

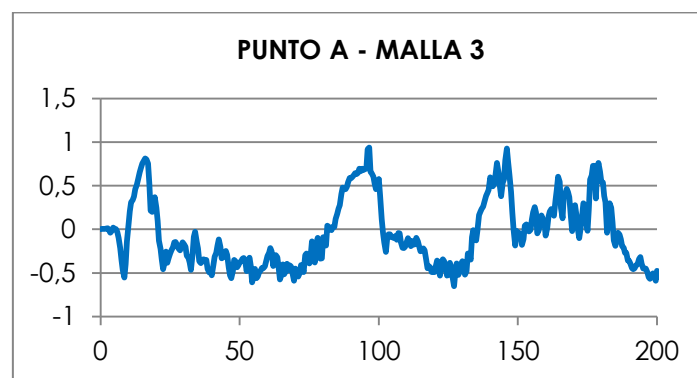
Luego, refinando la malla inicial para las mallas M2 y M3 los resultados obtenidos fueron muy diferentes. Las nuevas soluciones alcanzadas fueron mucho más inestables, y la pluma de burbujas presentó un comportamiento muy disímil de lo que se esperaba. En las gráficas siguientes, se puede comparar la solución de cada malla en un determinado punto A (**Figura 21**), donde se analiza el comportamiento de la velocidad vertical del líquido con el tiempo.



(a)



(b)



(c)

**Figura 24.** Comportamiento de la velocidad vertical del líquido por el tiempo en un determinado punto A de la columna. (a) M1, (b) M2 y (c) M3.

Estos resultados de M1, M2 y M3 indican que el régimen de flujo es de hecho turbulento, pues con mallas más finas se puede observar un cambio de comportamiento de la velocidad del líquido que pasa a ser cada vez más dinámica e inestable. El hecho de que la solución que mejor representó el experimento fue el de la malla más gruesa, indica un resultado falsamente turbulento. Esto puede ser explicado, pues probablemente la malla M1 suavizó los resultados, llevando a una difusión numérica que aproximó la solución de M1 a las soluciones turbulentas que se esperaba alcanzar.

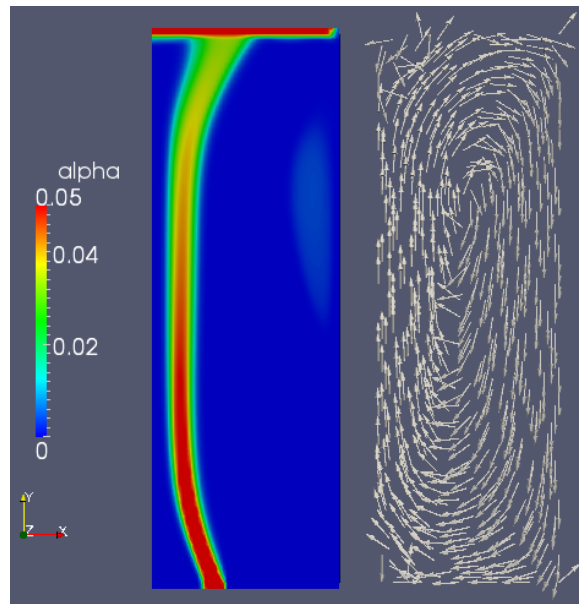
En general, con los testes en laminar, se espera llegar a un resultado transitorio, que promediado en el tiempo sea estacionario. En contrapartida, como los resultados de las tres mallas son muy diferentes y las mallas más finas están lejos de proporcionar un buen resultado con el promediado en el tiempo, se puede concluir que la malla

suficientemente fina adecuada para representar este flujo con un modelo laminar está muy lejos de la M3.

Por tanto, a partir de estos resultados es posible concluir que para una mejor representación de este caso sería necesario refinar aún más la malla M3, lo que sería inviable, ya que con un ordenador portable común los cálculos para M3 tardaron aproximadamente 12h. Teniendo esto en cuenta, la opción más factible es aplicar un modelo de turbulencia con una malla más gruesa.

### Turbulento 2D

A continuación, añadiendo un modelo de turbulencia k- $\epsilon$ , se obtuvo una solución muy estabilizada. El estacionario se alcanzó rápidamente, pues la turbulencia en modelos sencillos, como la geometría 2D, aumenta demasiado la viscosidad efectiva del líquido, lo que lleva a esta estabilización del sistema. Becker et al. (1994) alcanzó el mismo resultado cuando intentó reproducir su caso con un modelo turbulento, también en una geometría 2D.

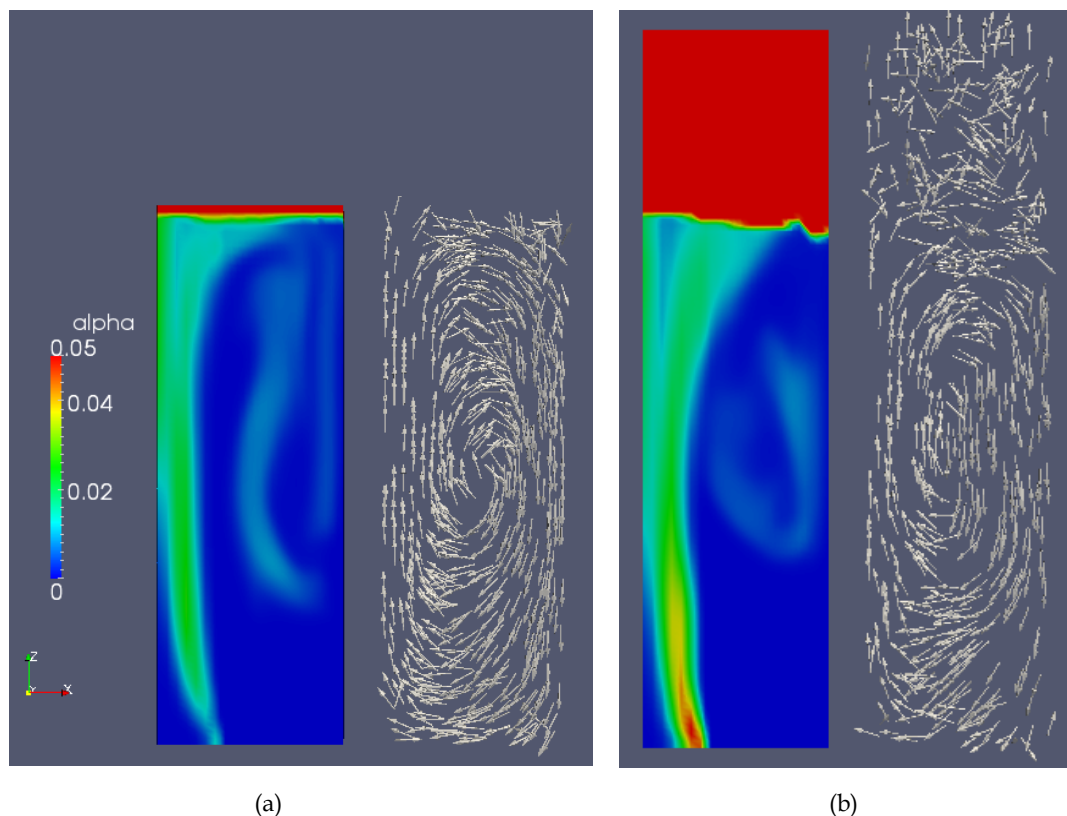


**Figura 25.** Comportamiento de la fracción de volumen del aire y de la velocidad del líquido en un determinado tiempo (M1 – Turbulento 2D).

Aún que el resultado sea estacionario y la pluma de burbujas siga pegada a la pared izquierda como en el experimento, el modelo de turbulencia aplicado a una geometría 3D demostraría resultados con mayor similitud a la realidad.

### Turbulento 3D

Con la finalidad de representar mejor el experimento, fueron realizadas nuevas simulaciones con una geometría 3D, donde el *sparger* está mejor representado, pues pasa a tener un formato circular en lugar de rectangular. Los testes fueron realizados inicialmente para la malla M4, que tiene la altura de 1,5m y luego para la M5 con la altura de 2m, como se puede observar en la **Figura 26**.

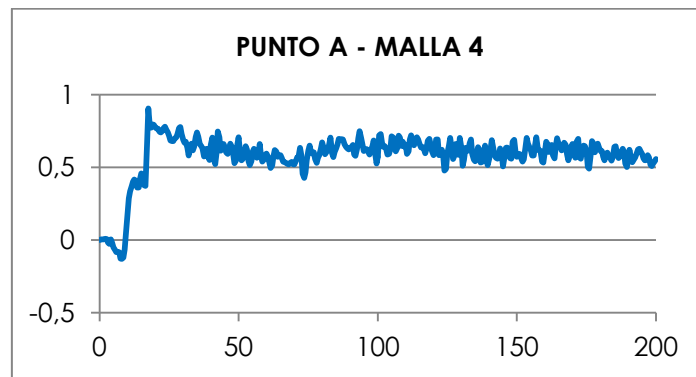


**Figura 26.** Comportamiento de la fracción de volumen del aire y de la velocidad del líquido en un determinado tiempo. (a) M4 y (b) M5.

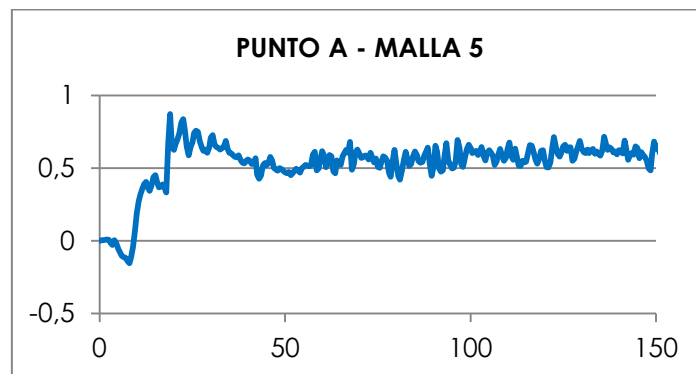


Los dos testes presentaron soluciones casi estacionarias, muy parecidas con el experimento. En los resultados se puede observar un flujo ascendente de la pluma que está pegado a la pared izquierda, mientras se observa también un flujo descendente de agua y burbujas a la derecha.

Además, las gráficas (**Figura 27**) muestran que la utilización de la altura real de la columna no cambia significativamente los resultados. De ambas formas, sea con M4 o M5, se llegó a soluciones casi idénticas. Por esto, como los dos resultados fueron muy parecidos y la solución con M4 es más sencilla y más rápida de se calcular, para la velocidad baja no se realizó ningún teste 3D con M5, solamente con M4.



(a)



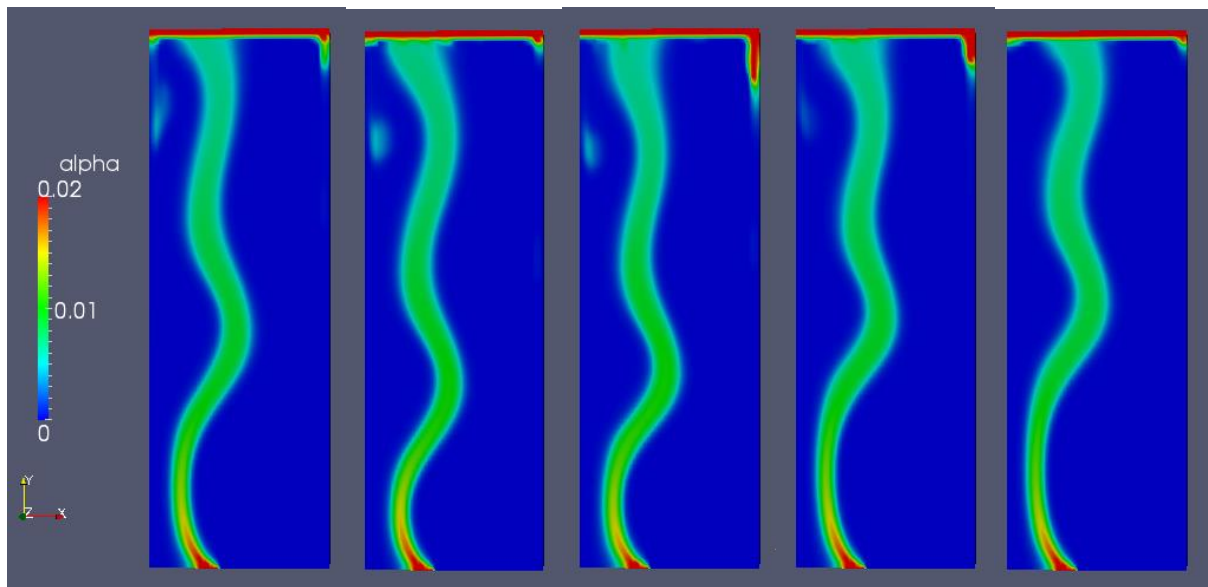
(b)

**Figura 27.** Comportamiento de la velocidad vertical del líquido por el tiempo en un determinado punto A de la columna. (a) M4 y (b) M5.

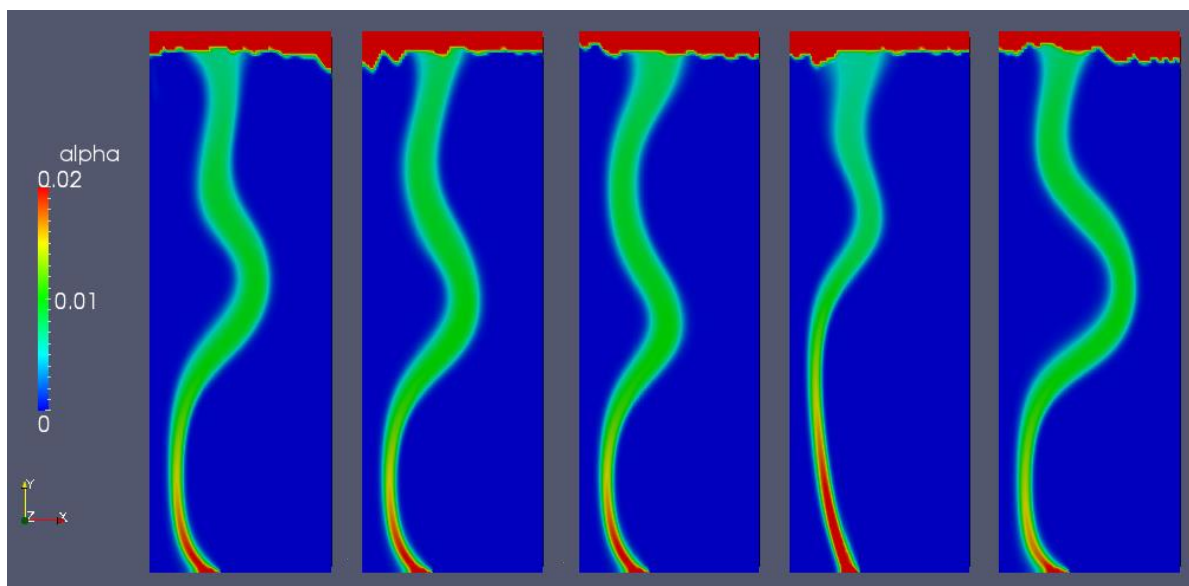
#### 4.3.3.2 Velocidad Baja

##### Laminar 2D

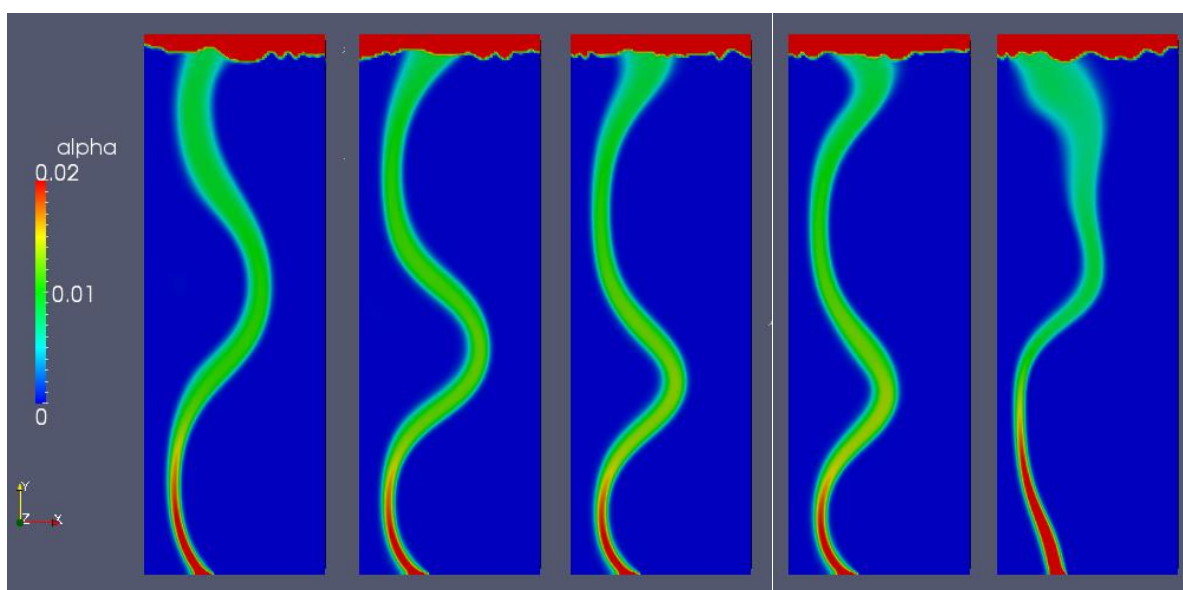
Los testes realizados con las mallas M1 (50x100x1), M2 (75x150x1) y M3 (100x225x1) resultaron en plumas sinuosas, con la parte inferior pegada a la pared, así como en experimento de Becker et al. (1994). Estos resultados demostraron soluciones cualitativas mejores que Sokolinchin et al. (1999) y Delnoij et al. (1997).



**Figura 28.** Comportamiento de la fracción de volumen y de la velocidad del líquido con  $\Delta t=10s$  (M1 – Laminar 2D).



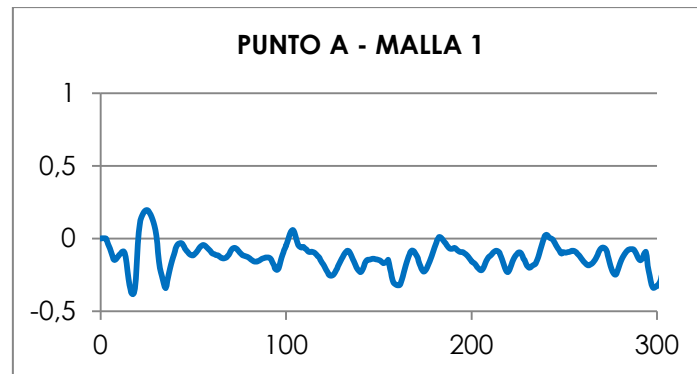
**Figura 29.** Comportamiento de la fracción de volumen y de la velocidad del líquido con  $\Delta t=10s$   
(M2 – Laminar 2D).



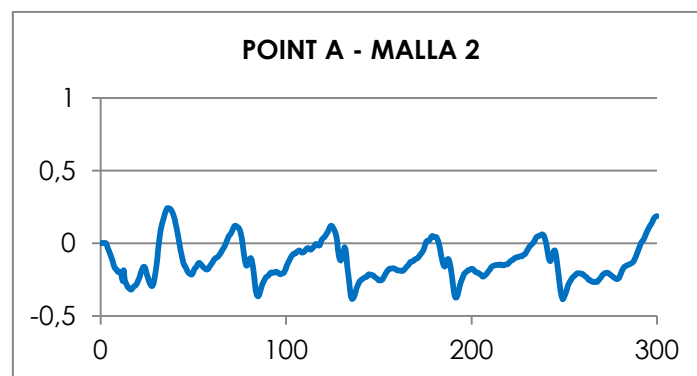
**Figura 30.** Comportamiento de la fracción de volumen y de la velocidad del líquido con  $\Delta t=10s$   
(M3 – Laminar 2D).

Por otro lado, cuando se realizó un análisis cuantitativo en el punto A de la columna, lo que se obtuvo fue que los resultados de M1 y M2 estaban bien, mientras que M3 se

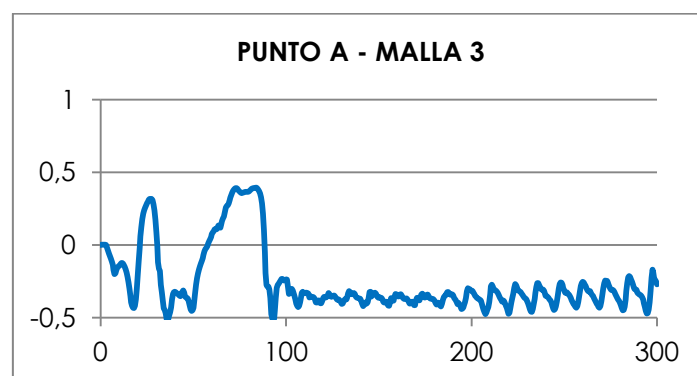
estabilizaba después de un tiempo, demostrando una solución cuantitativa muy diferente de M2 y M1.



(a)



(b)



(c)

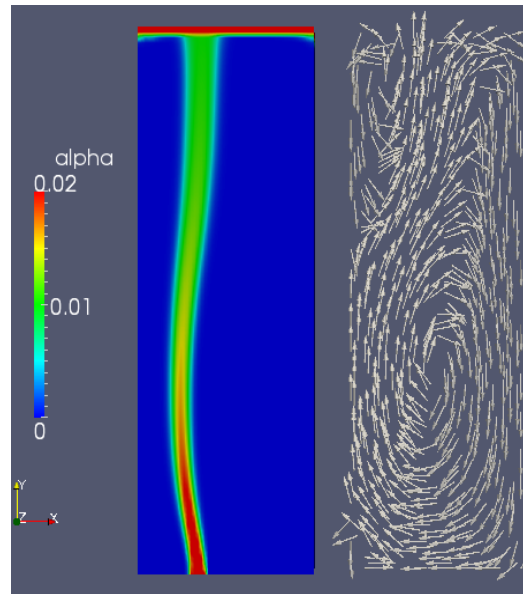
**Figura 31.** Comportamiento de la velocidad vertical del líquido por el tiempo en un determinado punto A de la columna. (a) M1, (b) M2 y (c) M3.

A partir de estos resultados, lo que se puede concluir es que así como para la velocidad alta, para el modelo laminar 2D representar bien un régimen turbulento, sería necesario una malla muy fina. En este caso, M3 que presenta soluciones tan diferentes, está muy lejos de esta malla suficientemente fina, pero como los cálculos de M3 ya tardaron demasiado, se torna interesante, en lugar de refinar aún más la malla, añadir el modelo de turbulencia que provocaría difusión, incrementando la viscosidad efectiva del líquido.

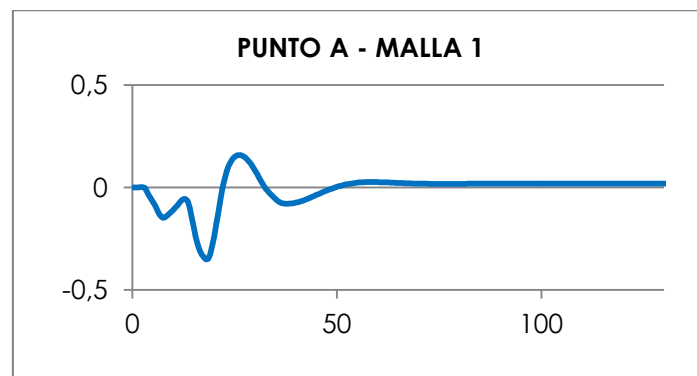
En vista de los resultados, una cuestión que surge es porque para la velocidad alta la solución de M1 es mejor, mientras que para la velocidad baja, M2 presenta el mejor resultado. Lo que se entiende, para modelos laminares en régimen turbulento, es que cuanto mayor es el número de Reynolds, más fina debe ser la malla. Por esto, en teoría la velocidad alta necesitaría siempre de una malla más fina que la velocidad baja, pero esto no explica los resultados obtenidos. Por tanto, lo que se concluye en este caso de estudio, es que la velocidad alta crea un flujo muy fuerte que no tiende a dispersarse por la columna y, por lo tanto, genera rápidamente una pluma fuerte y sencilla, lo que puede, por medio de difusión numérica, ser obtenido por una malla gruesa como M1. Cuanto a la velocidad baja, lo que ocurre es que la pluma es más lenta y se dispersa por la columna, trazando un camino más complejo que dentro de las mallas gruesas, sería mejor representado por una malla un poco más fina, como es el caso de M2.

### Turbulento 2D

Así como para la velocidad alta, teniendo en cuenta los resultados de la simulación para el régimen laminar 2D, los cuales presentaron dudas en relación a la fidelidad de un modelo laminar en representar un caso real que sea turbulento, se tornó interesante aplicar un modelo de turbulencia al caso de estudio. Aun así, como ya se esperaba, la turbulencia en una malla sencilla 2D, amortigua los vórtices, pues aumenta la viscosidad efectiva del líquido, llevando el sistema bifásico al estacionario. Este comportamiento puede ser observado en las figuras abajo. En la gráfica, el comportamiento inicial no estable se refiere a la estabilización del sistema bifásico.



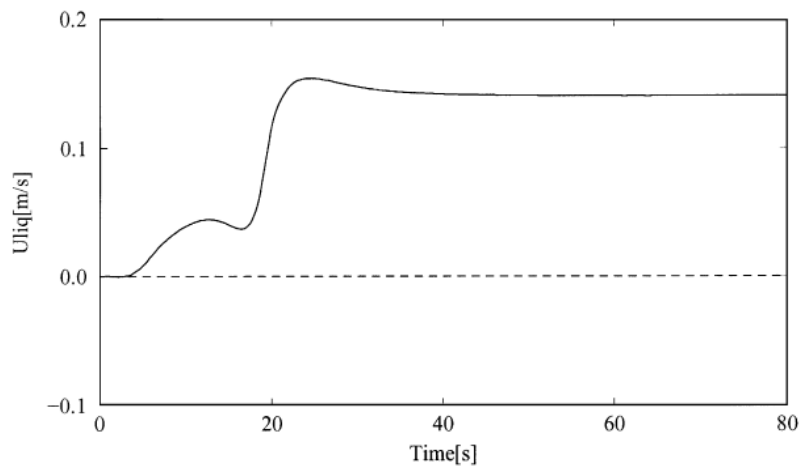
(a)



(b)

**Figura 32.** (a) Comportamiento de la fracción de volumen y de la velocidad del líquido en un determinado tiempo, y (b) Comportamiento de la velocidad vertical del líquido por el tiempo en un determinado punto A de la columna (M1 - Turbulento 2D).

Sokolichin et al. (1999) también aplicó la turbulencia para la simulación del mismo experimento con la velocidad baja en una malla 2D. Su resultado obtenido fue muy parecido al alcanzado con el *twoPhaseEulerFoam*, pues la solución también convergió al estacionario, como se puede observar en la gráfica siguiente.



**Figura 33.** Comportamiento de la velocidad vertical del líquido por el tiempo en un determinado punto A de la columna (Sokolichin et al., 1999).

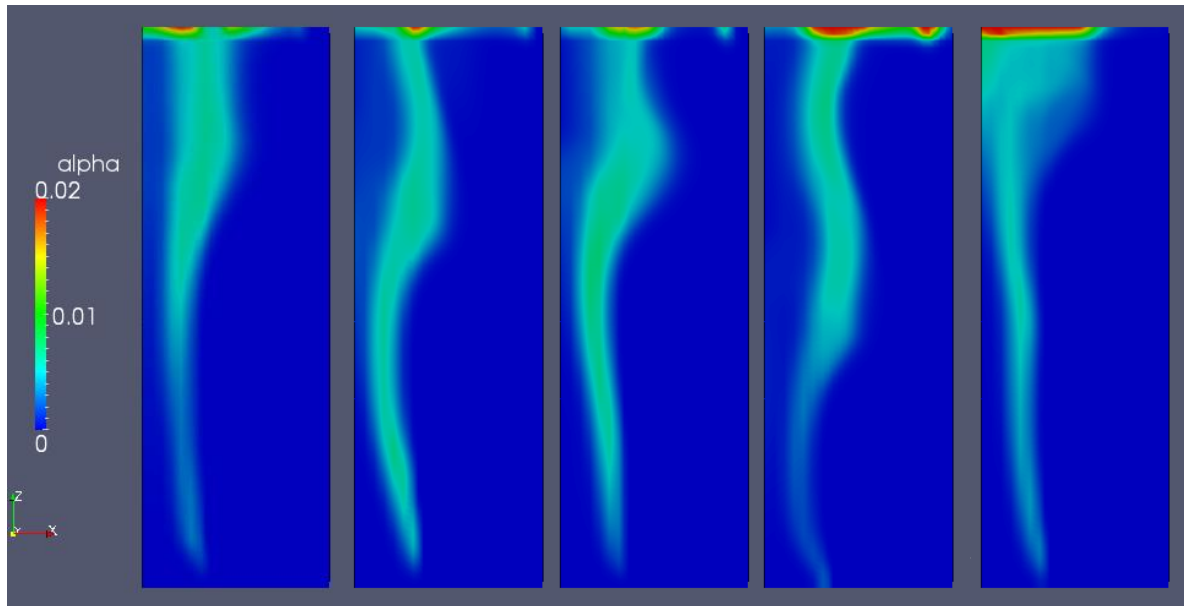
Comparando las dos gráficas es posible observar que ambas presentan valores muy distintos cuando llegan al estacionario. Esto ocurre, pues el modelo utilizado por el autor Sokolichin et al. (1999) es un modelo simplificado que utiliza una velocidad de slip constante de 0,2 m/s, que es claramente mucho más elevada que la velocidad de entrada del aire utilizada en este trabajo.

### Turbulento 3D

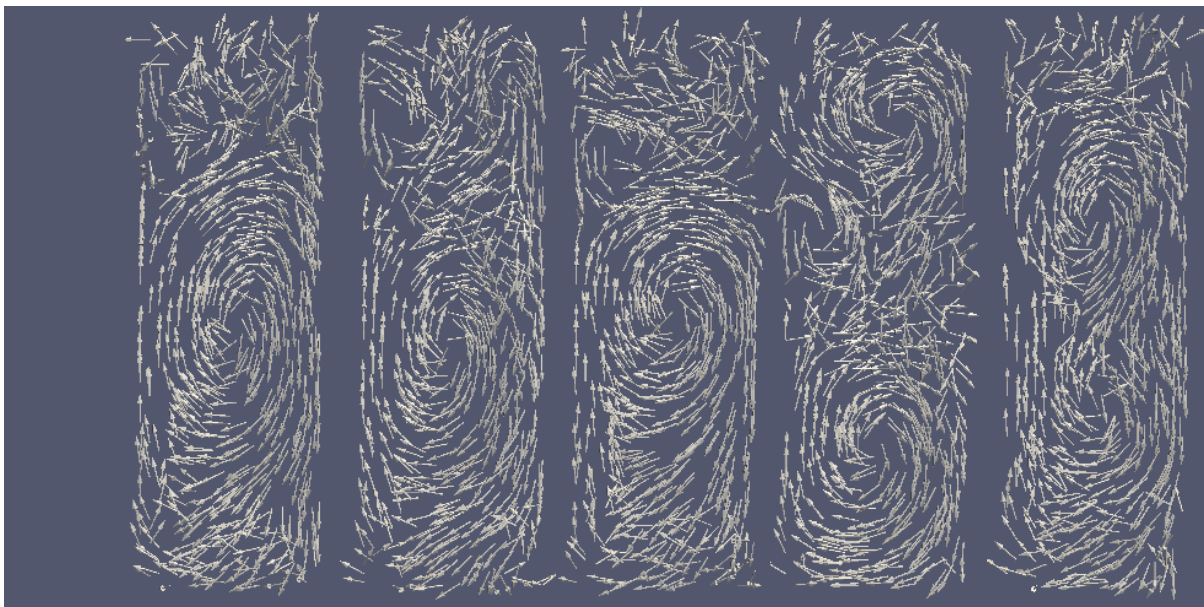
Los modelos 2D fueron utilizados inicialmente, pues normalmente para columnas de poca profundidad se supone que el flujo es básicamente bidimensional. Por otro lado, como ya explicado anteriormente, la presencia del régimen turbulento dificulta la representación en 2D, lo que torna la geometría 3D muy interesante, pues acerca la simulación del caso real. De ese modo, para el modelo turbulento 3D con velocidad baja, se aplicó la malla M4.

Como se puede observar en las figuras siguientes, las soluciones generadas con la geometría 3D obtuvieron los mejores resultados cualitativa y cuantitativamente. El comportamiento del fluido fue como se esperaba, pues la pluma obtenida fue sinuosa y

los vórtices formados por el movimiento de la fase continua han estado en constante cambio.



(a)

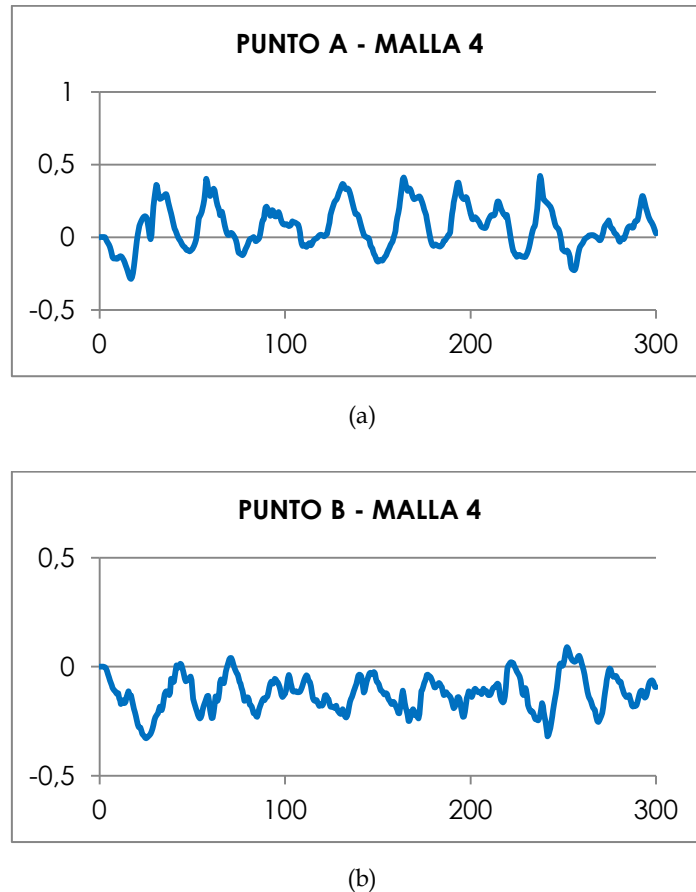


(b)

**Figura 34.** Comportamiento de (a) la fracción de volumen y de (b) la velocidad del líquido en un determinado tiempo.



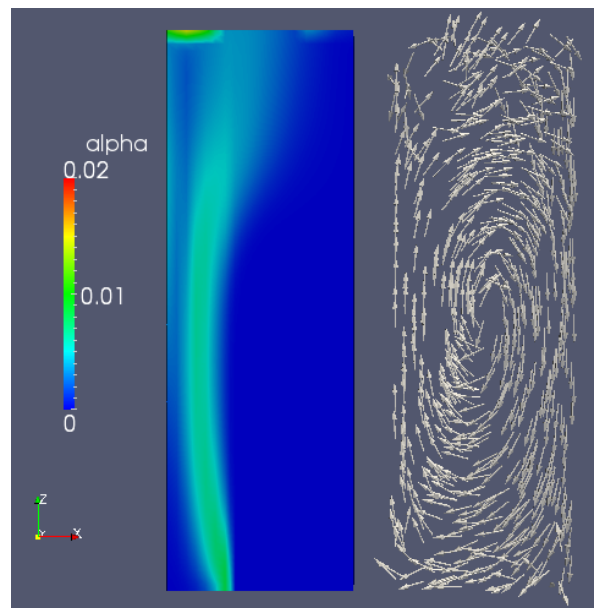
Los resultados estimados para la velocidad vertical del líquido de acuerdo con el tiempo para los puntos A y B (**Figura 21**), demostraron un comportamiento periódico similar al obtenido experimentalmente.



**Figura 35.** Comportamiento de la velocidad vertical del líquido por el tiempo en el  
(a) punto A y (b) punto B. (M4 – Turbulento 3D).

Además, a fin de probar la importancia de los modelos de discretización de orden superior, como los esquemas TVD, y demostrar que técnicas de primera orden como UPWIND llevan a efectos de difusión numérica, se repitieron las simulaciones 3D con esquemas UPWIND. Primero, se reprodujo el experimento con una geometría 3D donde el UPWIND fue aplicado apenas al término de la velocidad del líquido, así como en los casos anteriores 2D. La solución obtenida en estas condiciones fue conducida casi al estacionario, lo que es un resultado muy diferente del experimento

de la velocidad baja. Igualmente, cambiando todos los términos para UPWIND se obtiene un resultado extremadamente estable, que se parece con el turbulento 2D, como se puede observar en la **Figura 36**. Sokolinchin et al. (1999) también ha realizado simulaciones con el esquema de primer orden UPWIND, y obtuvo los mismos resultados.



**Figura 36.** Comportamiento de la fracción de volumen y de la velocidad del líquido en un determinado instante de tiempo.

#### 4.4 CONCLUSIONES

A partir de los resultados de la validación del modelo del *OpenFOAM*, es posible concluir que:

- Para reproducir regímenes turbulentos con modelos laminares, es decir simplemente con las ecuaciones básicas del modelo sin tener en cuenta la turbulencia, es necesario una malla demasiado fina para una buena solución. Lo que puede tornar el laminar inviable para algunos casos de regímenes turbulentos;

- Aplicar un modelo de turbulencia a una geometría 2D, tampoco es interesante, pues la turbulencia provoca una dispersión muy grande, amortiguando todos los vórtices y movimientos de los fluidos, llevando a un sistema muy estable y estacionario;
- Por otro lado, la reproducción en 3D juntamente con un modelo de turbulencia produce resultados satisfactorios comparados con el experimento. Es posible llegar a buenos resultados cuantitativos y cualitativos, mismo que sea con una malla gruesa;
- Además, soluciones obtenidas también comprobaron que para la geometría 3D, el uso de esquemas UPWIND para cálculo de variables que no sean de turbulencia provoca la difusión numérica, forzando el sistema al estacionario. Por lo tanto, esquemas TVD son preferibles y producen mejores resultados en 3D.



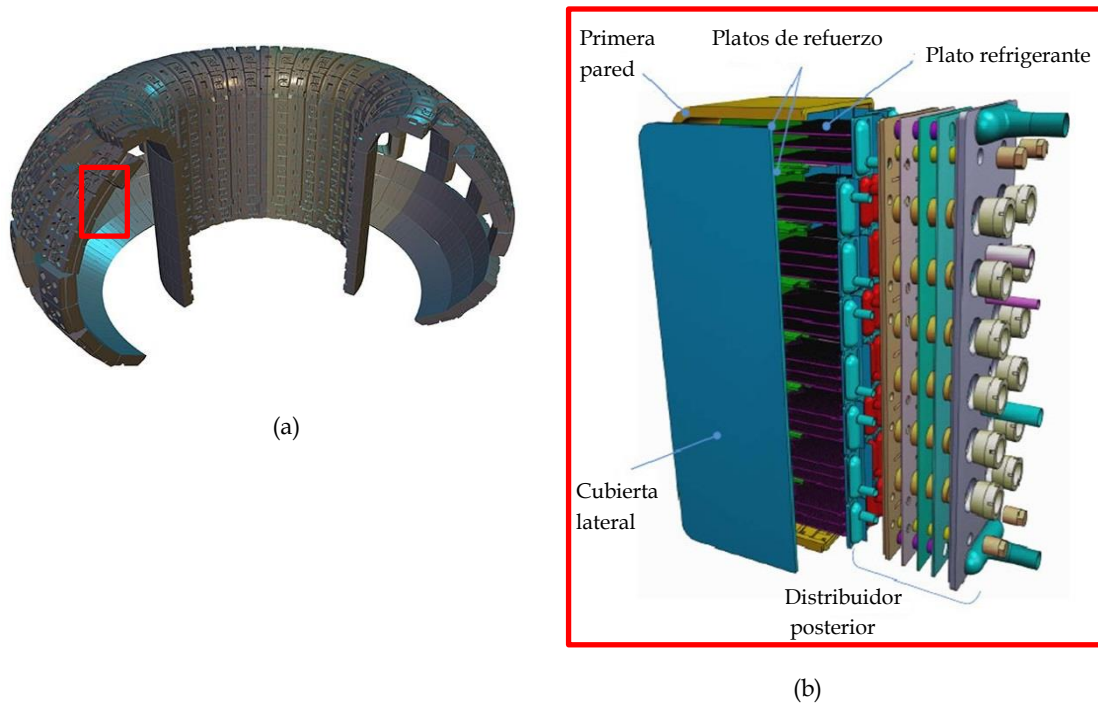
## 5. CASO DE APLICACIÓN: HCLL

En el presente capítulo se enseña el caso de aplicación a estudiar con el código *OpenFOAM*. También se describe la geometría a utilizar, las propiedades de los flujos implicados y la estrategia numérica seguida en las simulaciones. A continuación, se presentan los resultados obtenidos, comentarios y conclusiones.

### 5.1 INTRODUCCIÓN

Como se ha comentado en el capítulo 1 de introducción, la aplicación de interés de este trabajo es el estudio del comportamiento bifásico en el *breeding blanket* del tipo de metal líquido HCLL (con Pb-15,7Li como fluido regenerador de tritio y helio como refrigerante). Este sistema HCLL circunda todo el depósito que contiene el plasma de la reacción, lo que le permite recibir los neutrones generados en la fusión. Estos neutrones interaccionan con el litio y el plomo, generando el tritio como producto principal y el helio como subproducto. Existe la posibilidad de que este helio generado nucleee dando lugar a un flujo bifásico, PbLi con burbujas de helio. Se desconoce si el tamaño de las burbujas es nanométrico o micrométrico.

En el sistema HCLL, los canales con el metal líquido son divididos en módulos perpendiculares al campo magnético toroidal y son refrigerados por medio de un flujo de helio localizado en platos refrigerantes entre los canales de HCLL como se puede ver en la **Figura 37** (Mas de les Valls et al., 2011). En los módulos del *blanket*, la solución de metal líquido es inyectada y retirada por la parte posterior y la primera pared es la frontera del *blanket* con el dispositivo donde se encuentra el plasma de la reacción.



**Figura 37.** (a) Representación del *blanket* que circunda la zona del plasma y  
(b) módulos de *breeding blanket* en detalle.

El flujo bifásico en este tipo de canal de metal líquido puede tornarse muy complejo, por tanto, con el objetivo de ofrecer una visión global sobre el fenómeno, con el modelo validado del *OpenFOAM*, se han estudiado una serie de situaciones para analizar los efectos de las burbujas en la hidrodinámica del canal de metal líquido. Para esto, se estudiaron: (1) diferentes valores de Reynolds para el metal líquido (10 y 500), (2) diferentes magnitudes de generación de helio ( $10^{-9}$ ,  $10^{-5}$ ,  $10^{-4}$  y  $2 \cdot 10^{-4}$ ) y (3) diferentes diámetros de burbujas (micro y nano burbujas).

## 5.2 CASO DE ESTUDIO

A fin de caracterizar la naturaleza del flujo bifásico del HCLL, la geometría utilizada para el presente caso de estudio fue un canal simplificado en 2D, con la curva en forma de U cerca de la primera pared del reactor. Este canal estudiado corresponde al canal de entrada y salida de litio-plomo entre dos placas refrigerantes y placas de refuerzo,

donde el metal líquido entra por el canal inferior con una velocidad  $U_0$ . El canal incluye el hueco que une los canales de entrada y salida en la primera pared y, por esto, se denomina canal de curva en U.

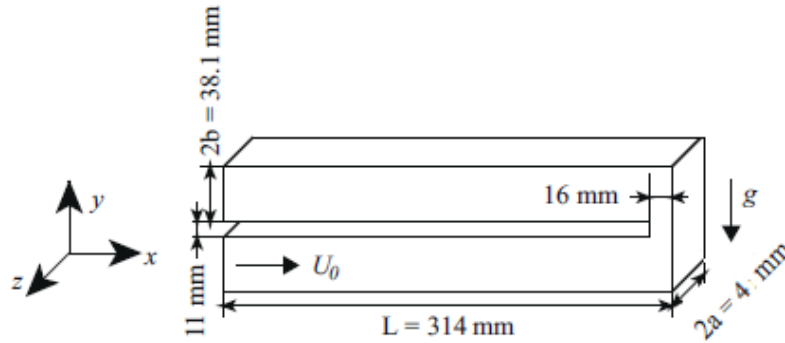


Figura 38. Geometría 2D del canal de metal líquido.

Para la solución de este caso, se añadió un término fuente ( $S_\alpha$ ) a la ecuación de  $\alpha$  en el *twoPhaseEulerFoam* (**Ecuación 3**). Este término añadido se refiere a la nucleación heterogénea del helio definida para todas las paredes del canal U.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_\phi \rho_\phi) + \nabla \cdot (\alpha_\phi \rho_\phi \mathbf{U}_\phi) = S_\alpha \quad (24)$$

El nuevo término  $S_\alpha$  es estimado para una determinada distancia de la pared del canal. Fuera de esta región  $S_\alpha$  es igual a cero. Para esto, se ha creado un pre proceso que calcula  $S_\alpha$  a partir de los datos introducidos en el diccionario *sourceDict*, en el directorio *constant*. En este diccionario se debe definir *sourceValue*, que es el valor de generación de *alpha*, y el término *offset*, que se refiere a la distancia de la pared que determina el dominio donde *alpha* es generado.

Las propiedades de los fluidos fueron determinadas a una temperatura de 450°C. Para la mezcla de metal líquido litio-plomo, los datos fueron determinados por Mas de les Valls et al. (2008) y los datos del gas helio en estas condiciones fueron obtenidos a partir de la literatura, Perry et al. (2008).

Las condiciones iniciales y de contorno se muestran en la siguiente tabla. Las velocidades iniciales del líquido fueron determinadas de acuerdo con el Reynolds. Es decir,  $U_b = 3,14 \cdot 10^{-5}$  ( $Re = 10$ ) y  $U_b = 1,71 \cdot 10^{-3}$  ( $Re = 500$ ).

**Tabla 7.** Condiciones iniciales y de contorno.

Variable	InternalField	Inlet	Outlet	Walls	FrontAndBack
alpha	Uniform 0	InletOutlet 0	Zero Gradient	Zero Gradient	Empty
p	Uniform 0	Uniform 0	Buoyant Pressure 0	Buoyant Pressure 0	Empty
Ua	Uniform (0 0 0)	Zero Gradient	Zero Gradient	Uniform (0 0 0)	Empty
Ub	Uniform (0 0 0)	Uniform ( $U_b$ 0 0)	Zero Gradient	Uniform (0 0 0)	Empty
Salpha	nonUniform	Zero Gradient	Zero Gradient	Zero Gradient	Empty

\*  $U_b = 3,14 \cdot 10^{-5}$  ( $Re = 10$ ) y  $U_b = 1,71 \cdot 10^{-3}$  ( $Re = 500$ ).

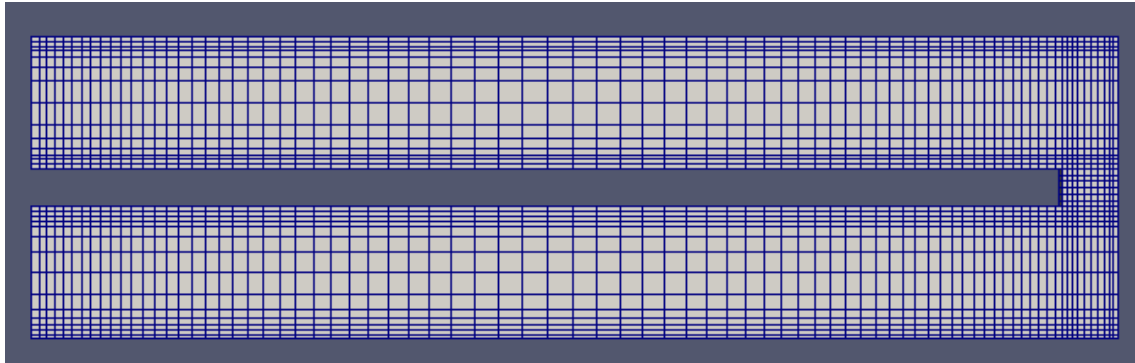
### 5.3 ESTRATEGIA NUMÉRICA

Las simulaciones fueron realizadas con tres mallas diferentes, una malla gruesa - M1 (3092 volúmenes), una malla fina - M2 (7706 volúmenes) y una malla doble fina - M3 (61648 volúmenes), como se puede observar en la **Figura 39**. M2 y M3 son más complejas y para los cálculos han requerido la función `adjustTimeStep` para mejor control del número de Courant. La desventaja es que esta función aumenta mucho el tiempo de cálculo para obtener los resultados numéricos. En contrapartida, la M1, que es una malla más simplificada que las anteriores, puede solucionar los testes con un buen número de Courant y con un *timeStep* de magnitud fijada en  $10^{-5}$ s, que es más rápido de lo que se tenía para M2 y M3.

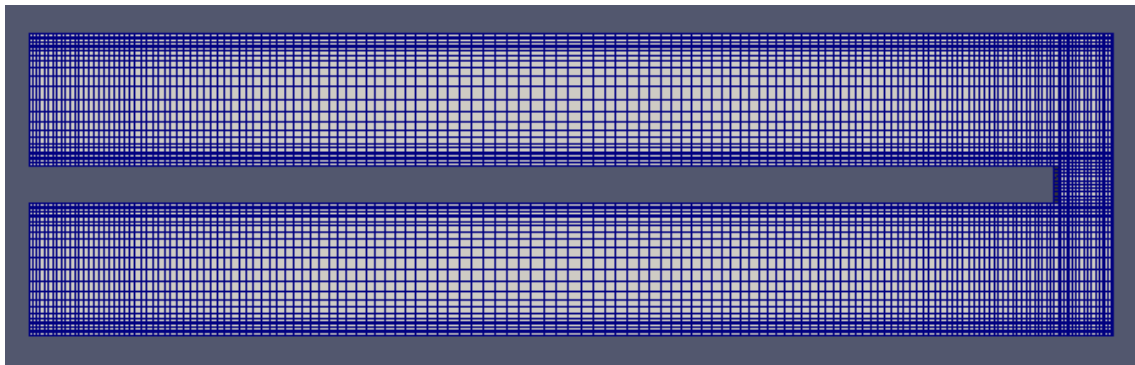
En general, los testes realizados para el diámetro micro para los 100s iniciales de la simulación con las mallas M1 y M2 tardaron alrededor de 8:30h de cálculo, mientras



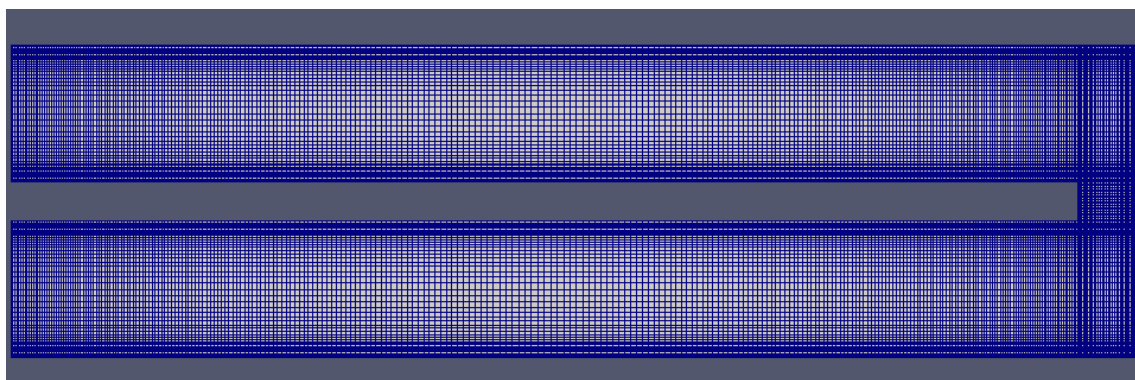
que para la malla M3, los cálculos para los mismos 100s iniciales tardaron aproximadamente 96h. Para el nano diámetro los cálculos tardaron mucho, pues el sistema llevó más tiempo para llegar al estacionario, aproximadamente 2500s. Luego, los cálculos tardaron aproximadamente de 72h hasta 96h.



(a)



(b)



(c)

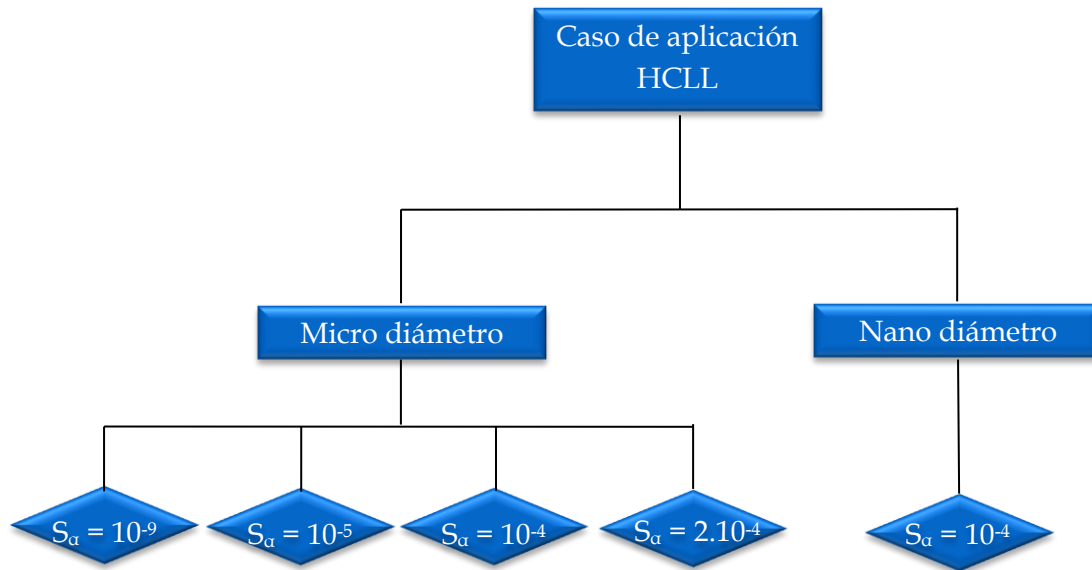
**Figura 39.** (a) Malla Gruesa – M1, (b) Malla Fina – M2 y (c) Malla Doble Fina – M3.

Cuanto a los esquemas numéricos, fueron utilizados los mismos que en el capítulo 4 de la validación del modelo. Es decir, fue utilizado el esquema Gauss linear para todos los

términos difusivos, el esquema UPWIND para la velocidad del líquido (modelo laminar y 2D), el esquema TVD para todos los otros parámetros y el esquema Gauss lineal corregido para los laplacianos. La presión fue solucionada con el solver lineal GAMG (*Generalised geometric-Algebraic Multi-Grid*) y la velocidad con el smoothSolver. La unión de las dos ecuaciones fue realizada con el algoritmo SIMPLE.

## 5.4 RESULTADOS

En realidad, como no se conoce el diámetro de las burbujas que se forman dentro de los canales de metal líquido, ni se sabe exactamente la tasa de generación de helio, las soluciones del presente trabajo se basaron en el estudio del efecto de estos factores en la hidrodinámica del metal líquido y por tanto, diversos valores de estos parámetros fueron cambiados y testados durante las simulaciones. También se estudió la influencia del Reynolds en el comportamiento de los flujos en estas diferentes situaciones.



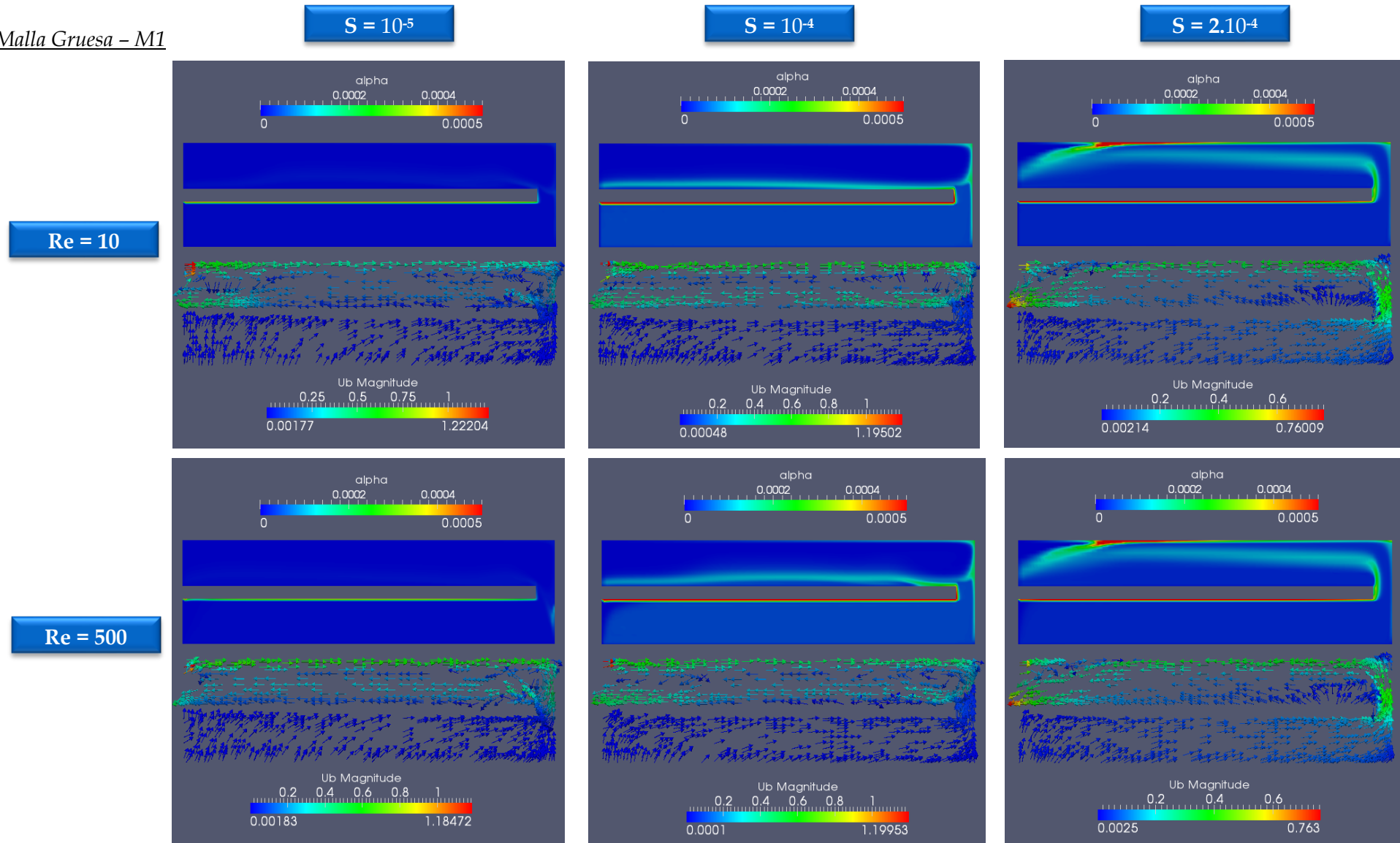
**Figura 40.** Simulaciones realizadas para el caso de interés.

En la **Figura 40**, se esquematizan los distintos casos estudiados (independientemente del Reynolds). Los rombos se refieren a la generación ( $S_\alpha$ ) de la fracción de volumen de

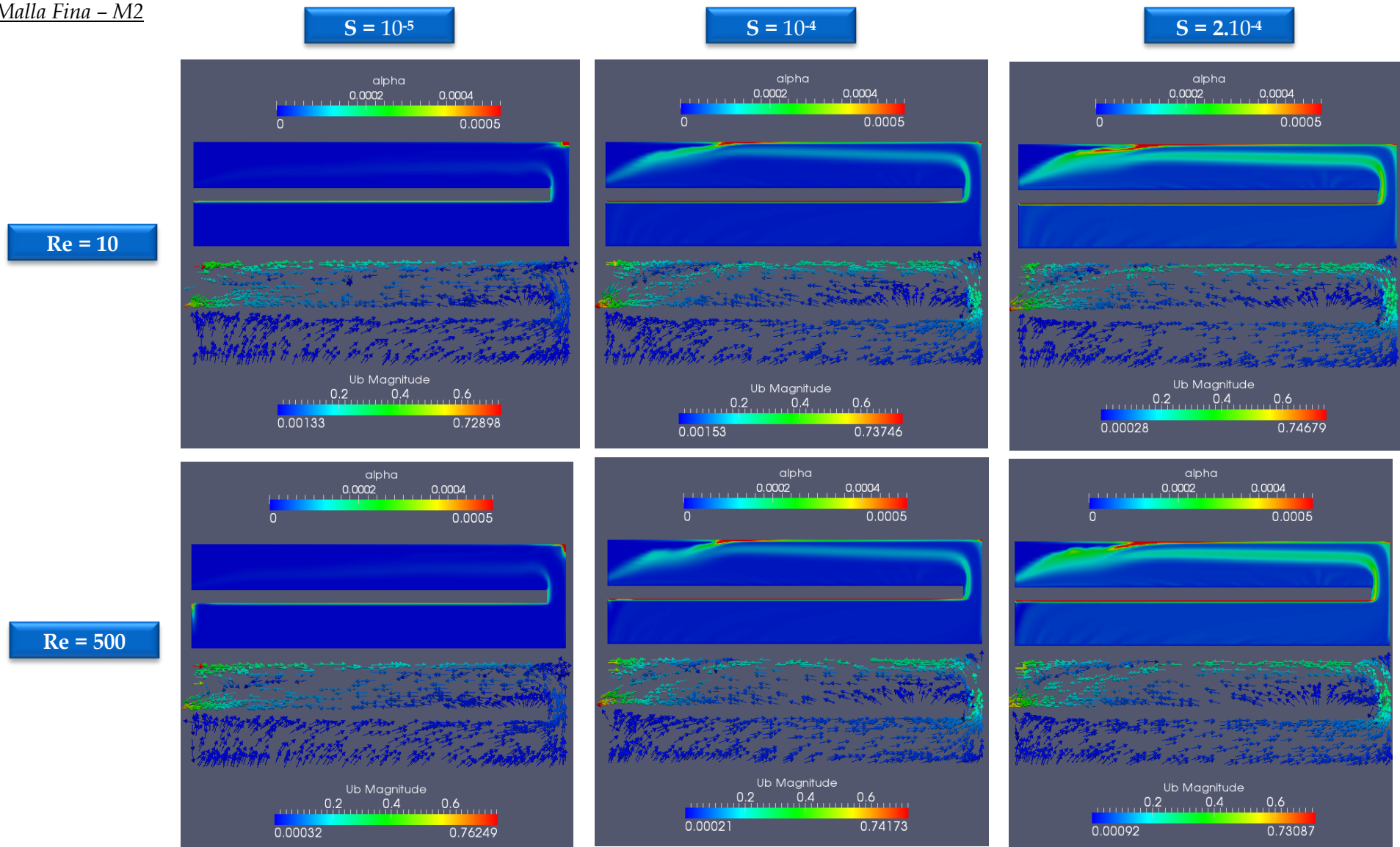
helio que ha sido testada con los valores de  $10^{-9}$ ,  $10^{-5}$ ,  $10^{-4}$  y  $2 \cdot 10^{-4}$ . Los resultados obtenidos están presentados y comentados a continuación.

#### 5.4.1 MICRO DIÁMETRO

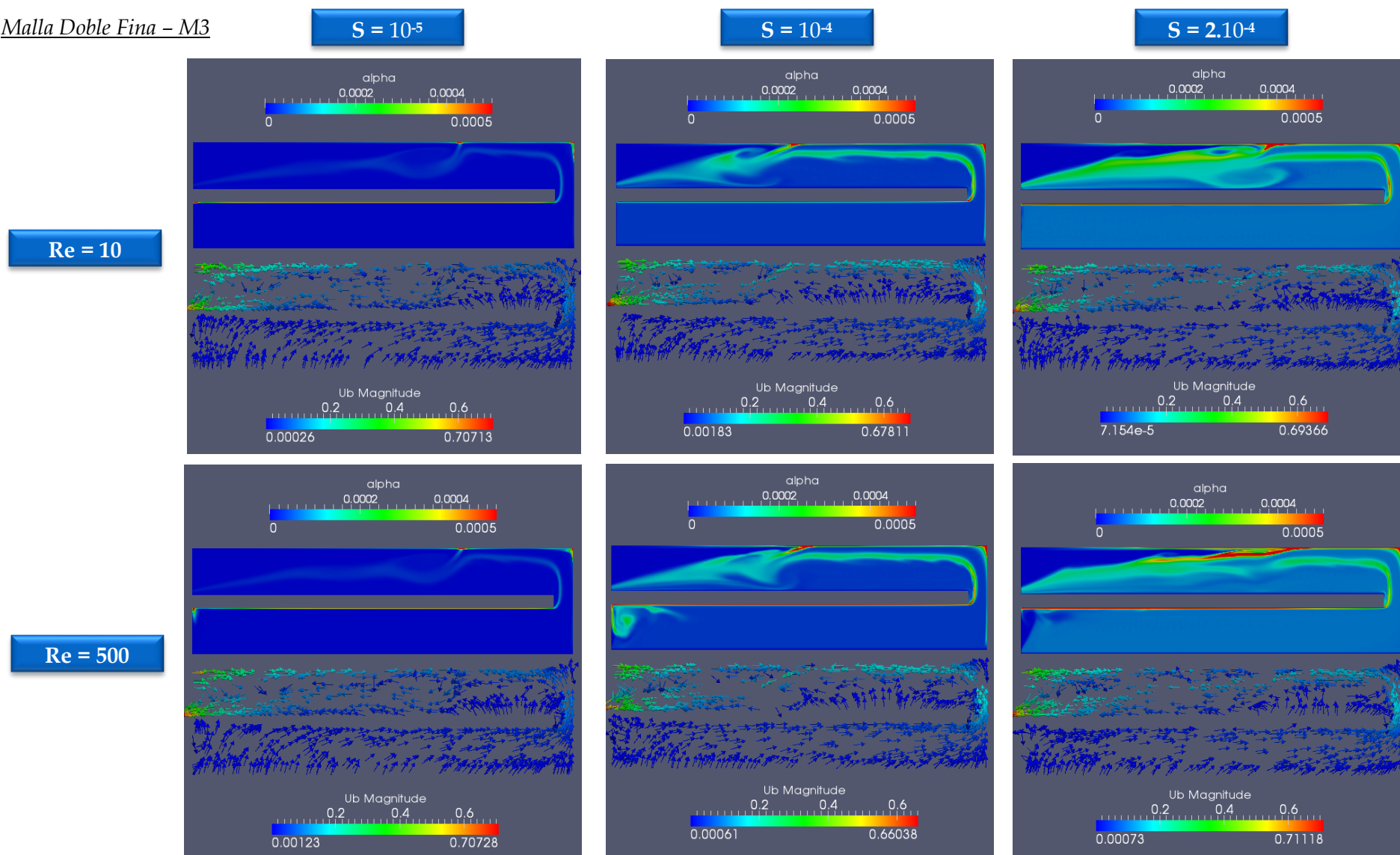
Las siguientes figuras (**Figura 41, 42 y 43**) muestran los resultados obtenidos para el diámetro micrométrico.

*Malla Gruesa – M1*

**Figura 41.** Resultados obtenidos para la fracción de volumen de la fase dispersa y la velocidad del líquido (M1).

*Malla Fina - M2*

**Figura 42.** Resultados obtenidos para la fracción de volumen de la fase dispersa y el perfil la velocidad del líquido (M2).

*Malla Doble Fina – M3*

**Figura 43.** Resultados obtenidos para la fracción de volumen de la fase dispersa y el perfil la velocidad de la fase continua (M3).



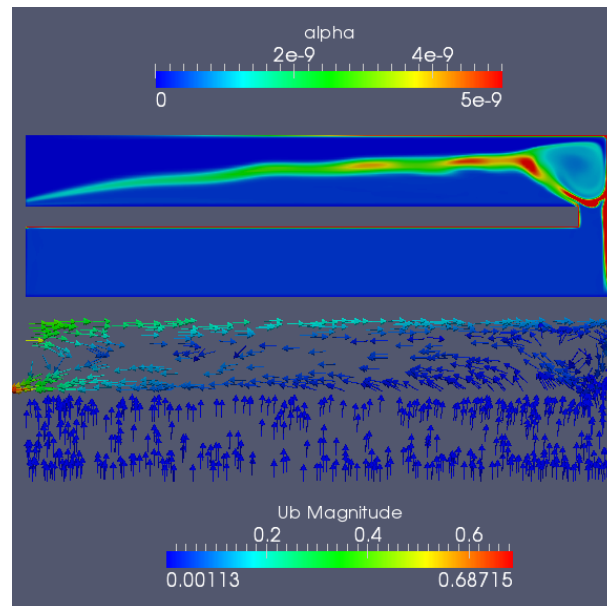
Los resultados anteriores presentados para los valores de generación:  $10^{-5}$ ,  $10^{-4}$  y  $2 \cdot 10^{-4}$ , mostraron que las mallas M2 y M3 obtuvieron soluciones más parecidas y que el resultado de la malla doble fina (M3) es el más fiable, ya que es la malla más detallada del modelo laminar utilizado. Después de observar estas simulaciones, es posible decir que el tamaño micro de las burbujas afecta la hidrodinámica del flujo, puesto que la velocidad que este ha alcanzado dentro del canal es mucho más alta que la velocidad inicial del metal líquido inyectado.

En todos los casos se ha podido comprobar como la curva U es estrecha y provoca la formación de un chorro de fluido de mayor velocidad que puede chocar con la pared superior del canal de salida. Por otro lado, debido a la fuerza de flotación, las burbujas generadas se han acumulado siempre en las paredes superiores de ambos los canales y debido a la fuerza de arrastre, las burbujas han sido arrastradas por el flujo hasta la curva estrecha donde también han salido a una mayor velocidad juntamente con el fluido de metal líquido. Las diferencias entre los resultados estudiados radican principalmente en el comportamiento del flujo en el canal de salida.

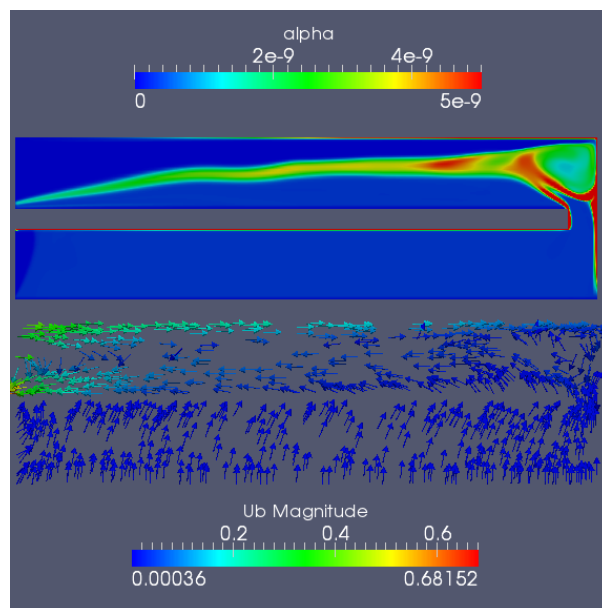
En vista de los resultados, se puede decir también que para un mismo valor de generación de helio, casi no hay diferencia entre los valores de Reynolds puesto que la velocidad de entrada influye poco en el perfil de velocidad en el canal. Igualmente, los diferentes valores de generación también afectan poco el comportamiento final del fluido. Evidentemente, cuanto menor es el valor de generación de helio, menos burbujas se tendrán al final. Para el caso de generación de  $10^{-9}$  se puede ver que las burbujas son aún arrastradas por el fluido y se acumulan en las mismas regiones, paredes superiores y zonas con menor velocidad (**Figura 444**).

La malla doble fina (M3) ha presentado resultados que tienen la formación de vórtices a lo largo de la pluma de burbujas. Esto puede indicar que se trata de un régimen turbulento. Pero como las mallas obtuvieron resultados parecidos (M2 y M3), el modelo laminar se queda satisfactorio para representar estas simulaciones.

Además, es importante comentar que debido a la condición de contorno impuesta en la salida se obtiene un vórtice en esta región que genera un flujo que entra en el canal superior. Esto conlleva a la inducción de más vórtices a lo largo de este canal de salida.



(a)



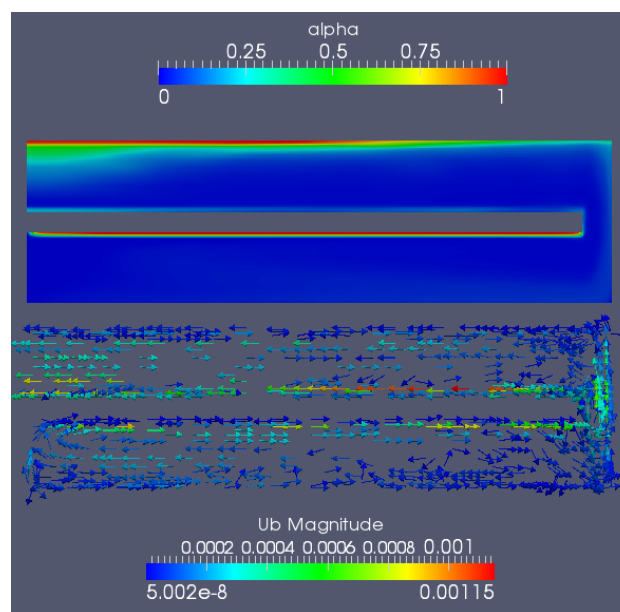
(b)

**Figura 44.** Resultados obtenidos para la generación de  $10^{-9}$  y micro diámetros, donde (a)  $Re = 10$  y (b)  $Re = 500$  (Malla doble fina - MDF).

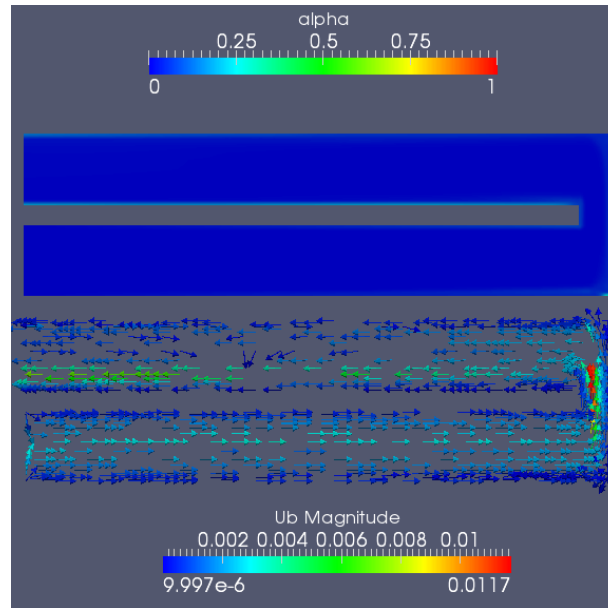


### 5.4.2 NANO DIÁMETRO

Con las burbujas de diámetro nano, el comportamiento del flujo bifásico fue más estable. Para este caso, resultados con las mallas M1 y M2 ya fueron satisfactorios. Se puede observar en la **Figura 45** que para la malla M1 y un valor de generación de  $10^{-4}$ , para el Re igual a 500 las burbujas de nano diámetro afectan poco la hidrodinámica del fluido, mientras que si reducido el Re a 10, la hidrodinámica pasa a estar influenciada por la presencia de las burbujas. A pesar de ello, esta influencia es mucho menor que con el tamaño mayor micro. De hecho, la velocidad máxima es 2 ordenes de magnitud menor para el tamaño nano (**Figura 42**).



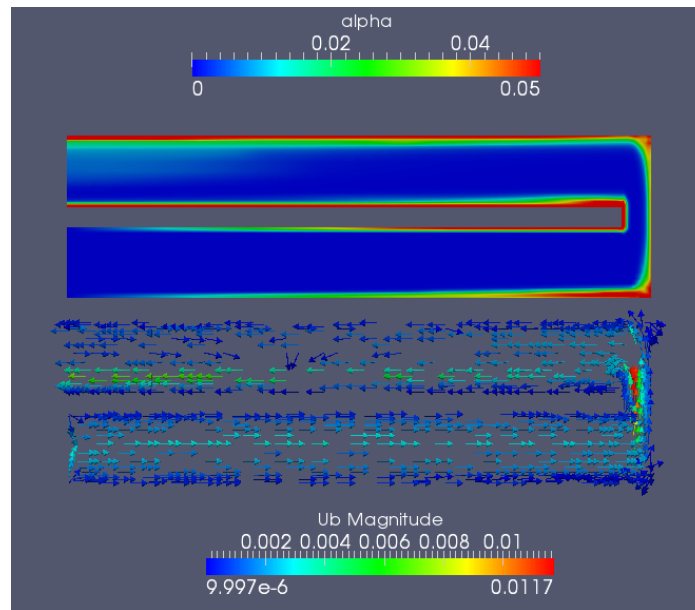
(a)



(b)

**Figura 45.** Soluciones para nano burbujas y (a)  $Re = 10$  y (b)  $Re = 500$ . (Malla MDF)

En la **Figura 455** se ha podido percibir que cuanto mayor es la velocidad inicial, menos burbujas se encuentran en el canal pues son más arrastradas por el metal líquido. Además, es posible observar también que para diferentes velocidades, las burbujas se concentran en lugares diferentes. Para la velocidad baja, en el canal inferior de entrada se forma un vórtice grande antes de la curva U. Debido a este vórtice, las burbujas se acumulan en la pared superior del canal de entrada. Después de pasar por la curva, las burbujas se acumulan en la pared superior debido a otro gran vórtice que se forma en este canal. En contrapartida, para el Reynolds alto, la velocidad de entrada del líquido es más alta y tiene más fuerza para provocar una fluidización más estable. Por tanto, en este caso, lo que ocurre es que las burbujas se acumulan más en el canal superior en las paredes donde la velocidad del líquido es casi nula (**Figura 4646**).



**Figura 46.** Solución para nano burbujas y  $Re = 500$  con leyenda mejorada.

### 5.4.3 CONCLUSIONES

A partir de los resultados presentados en este capítulo, se ha podido concluir que las burbujas de helio formadas en el canal del breeding blanket del tipo HCLL pueden afectar considerablemente la hidrodinámica del metal líquido, lo que confirma la importancia de este estudio. En las simulaciones testadas con determinados valores de generación, incluido valores muy pequeños, se ha observado la acumulación de burbujas en las paredes superiores y zonas de velocidad baja. Esto puede afectar la transferencia de masa y calor dentro de los canales de metal líquido, lo que puede alterar la permeación del tritio y dar lugar a una baja eficiencia térmica de los breeding blankets.

A modo de resumen, sobre el comportamiento físico de los resultados obtenidos sobre la aplicación de interés se puede decir que:

- Las micro burbujas afectan mucho la hidrodinámica del líquido y las nano burbujas afectan muy poco;

- Para las micro burbujas, la velocidad final del líquido es influenciada mayoritariamente por las fuerzas de lift y virtual mass y por tanto, diferentes Reynolds prácticamente no afectan en nada el comportamiento de este sistema de flujo bifásico;
- Además, aunque la fuerza de drag sea fuerte, ya que las micro burbujas en gran parte son arrastradas juntamente con el flujo principal de la fase continua, aún ocurre gran acumulación de helio en las paredes superiores de los canales de entrada y salida, y en la pared interior de la curva;
- También se puede concluir que diferentes valores de generación de helio afectan muy poco. La diferencia es que cuanto más generación hay en el canal de HCLL, mayor concentración de helio se tendrá en el estacionario;
- Por otro lado, las nano burbujas influyen menos en la hidrodinámica del sistema bifásico en estudio, especialmente para Reynolds altos (500). En estos casos, el transporte de burbujas se puede modelar considerándoles un escalar pasivo (que no afecta el flujo principal).

Para mejorar estos resultados, sería interesante simular este caso para valores cada vez menores de  $Sa$ , para que se pudiera comprender mejor el origen de la formación del vórtice en el outlet. Además, para soluciones más fiables, como ya fue explicado en el capítulo anterior sobre la validación del modelo, sería muy importante hacer las mismas simulaciones para una geometría 3D, puesto que la malla más fina con 2D ha presentado indicios de turbulencia. Por ahora, el cálculo 3D ha sido inviable teniendo en cuenta la capacidad computacional de que se dispone.

## 6. CONCLUSIONES

En este trabajo de investigación se ha estudiado los efectos de la presencia de burbujas de helio en la hidrodinámica de los canales de HCLL.

Para esto, ha sido imprescindible el estudio y comprensión del comportamiento físico de los flujos gas-líquido, así como la determinación de las ecuaciones matemáticas y los modelos que pudieran describir de la manera más precisa el comportamiento detallado de este fenómeno. Por medio del código de fluido-dinámica computacional, *OpenFOAM*, se ha desarrollado y validado la metodología de fluido bifásico a ser utilizada. Estas etapas han sido fundamentales para adquirir el *know-how* necesario acerca del comportamiento provocado por las fuerzas e interacciones implicadas en los flujos gas-líquido.

El modelo matemático ya validado se ha aplicado al caso de interés. Los resultados presentados en el capítulo 5 han mostrado que de hecho la nucleación heterogénea de burbujas puede tener una gran influencia en el comportamiento hidrodinámico del metal líquido, lo que puede afectar negativamente a la eficiencia de generación y de extracción de tritio. Las conclusiones más importantes acerca del análisis del *breeding blanket* fueron: (1) las micro burbujas afectan mucho más el comportamiento del flujo que las nano burbujas; (2) las fuerzas de *drag*, *lift* y *virtual mass* tienen gran influencia en el flujo bifásico; (3) las burbujas se quedan acumuladas en las paredes superiores y zonas de velocidad baja; (4) la magnitud de la generación de helio afecta poco a la hidrodinámica; y (5) para las nano burbujas, cuanto más elevado es el Reynolds, menor es la influencia en la hidrodinámica del metal líquido (en estos casos de Re elevado y nano burbujas se puede considerar el transporte de burbujas como un escalar pasivo).

Por lo tanto, las soluciones obtenidas durante el estudio del flujo bifásico dentro de los *breeding blankets* de metal líquido han probado la importancia de esta línea de estudio para la tecnología de fusión nuclear. Ciertamente, el presente estudio es simplemente un primer paso y aún quedan muchos aspectos por analizar, pero se trata de una contribución importante para la línea de investigación del diseño y desarrollo de los *breeding blankets* de HCLL.

En esta misma línea de estudio, para la mejora del entendimiento de este fenómeno bifásico y sus consecuencias para la fusión nuclear, lo que se propone como acciones futuras a este proyecto son: (1) una estimación precisa del factor de generación de helio dentro de los canales de HCLL, lo que implica un estudio más detallado sobre cómo se origina esta nucleación en las condiciones de trabajo del *blanket*, y (2) el acoplamiento de este estudio de flujo bifásico con modelos ya estudiados y desarrollados que tienen en cuenta el transporte de tritio, transferencia de calor y campo magnético. La unión de estos modelos llevaría a una reproducción más fiable de lo que puede ocurrir dentro de los canales de metal líquido.

## ANEXO – TWOPHASEEULERFOAM

Como se ha dicho anteriormente, este *solver* es utilizado para sistemas que tengan dos fases de fluidos incompresibles, donde una fase es continua y la otra dispersa. El *twoPhaseEulerFoam* fue elegido para este trabajo como la opción más conveniente ya que es un modelo de enfoque Euler-Euler, tiene en cuenta las contribuciones de las fuerzas de *lift*, *drag* y *virtual mass*, y puede utilizar tanto la mezcla como solo la fase dispersa para calcular el coeficiente de arrastre.

### A.1 HIPÓTESIS

El solver *twoPhaseEulerFoam* está definido para un cierto tipo de flujo con determinadas hipótesis. Dichas hipótesis son: (Fuente: Fundación *OpenFOAM*):

- Las fases son incompresibles;
- El diámetro de la fase dispersa es constante;
- El flujo es isotérmico;
- Solo puede haber una fase dispersa y una fase continua;
- Efectos de agregación, colapso y coalescencia deben ser despreciados;
- La interacción de las fases solo ocurre por medio del cambio de momento:
  - No es posible modelar la transferencia de calor entre las fases;
  - No es posible modelar la transferencia de masa entre las fases;
  - No hay modelo de reacción química disponible.

### A.2 ECUACIONES

Para el presente trabajo, se ha elegido el modelo Euler-Euler, pues se trata de un método más simplificado y más sencillo de manipular. Las ecuaciones básicas

constituyentes de este modelo están presentadas a continuación. Es importante destacar que solo el intercambio de momento entre la fase dispersa y la fase continua fue llevado en cuenta, no se planteó intercambio de calor.

Para la modelización de la turbulencia, se siguió la estrategia RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*), es decir, se trabajó con las variables promediadas en el tiempo y se añadió un nuevo término de tensiones viscosas a la ecuación de momento.

La fracción de volumen (*void fraction*), representada por  $\alpha$  en las ecuaciones que siguen, es uno de los parámetros más importantes para caracterizar flujos bifásicos. Para flujos gas-líquido, este término puede ser definido como la fracción del volumen que está ocupado por la fase gaseosa.

### 3. Ecuación de continuidad para cada fase $\varphi$ .

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_\varphi \rho_\varphi) + \nabla \cdot (\alpha_\varphi \rho_\varphi \mathbf{U}_\varphi) = 0 \quad (3)$$

### 4. Ecuación del momento $M_\varphi$ .

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_\varphi \rho_\varphi \mathbf{U}_\varphi) + \nabla \cdot (\alpha_\varphi \rho_\varphi \mathbf{U}_\varphi \mathbf{U}_\varphi) + \nabla \cdot (\alpha_\varphi \mathbf{Re}_{\varphi, \text{eff}}) = -\alpha_\varphi \nabla p + \alpha_\varphi \rho_\varphi \mathbf{g} + M_\varphi \quad (4)$$

Donde el tercer término (**Ecuación 4**) define el tensor de tensiones de Reynolds, que representa las tensiones para cada fase y tensiones turbulentas:

$$\mathbf{Re}_{\varphi, \text{eff}} = -v_{\varphi, \text{eff}} \rho_\varphi \left[ \nabla \mathbf{U}_\varphi + \nabla^T \mathbf{U}_\varphi - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{U}_\varphi) \mathbf{I} \right] + \frac{2}{3} \rho_\varphi \kappa_\varphi \mathbf{I} \quad (5)$$

La variable  $k_\varphi$ , de la ecuación anterior, representa la energía cinética de turbulencia de las fases. Para la implementación de la simulación numérica es considerado que  $k_\varphi$  de la fase dispersa y de la fase continua son iguales.



$\nu_{\phi,eff}$  es la viscosidad efectiva. Esta puede ser calculada sumándose la viscosidad molecular con la viscosidad turbulenta, como presentado a seguir:

$$\nu_{\phi,eff} = \nu_{\phi} + \nu_{\phi,t} \quad (6)$$

El término  $\nu_{\phi,t}$  de la **Ecuación 6** representa la viscosidad cinemática de turbulencia de una fase, y es definida como:

$$\nu_{\phi,t} = C_{\mu} \frac{\kappa_{\phi}^2}{\epsilon_{\phi}} \quad (7)$$

Donde  $C_{\mu}$  es una constante, y  $\epsilon_{\phi}$  es la tasa de disipación turbulenta de las fases.

El término  $M_{\phi}$ , de la ecuación de momento (**Ecuación 4**), es descompuesto en fuerzas diferentes como en la contribución de arrastre (*drag*), la contribución de *lift* y la contribución de *virtual mass*.

$$M_{\phi} = M_{\phi,drag} + M_{\phi,lift} + M_{\phi,vm} \quad (8)$$

Utilizando  $d$  y  $c$  para identificar las dos fases del sistema, donde  $d$  representa la fase dispersa, mientras  $c$  la fase continua, es posible definir los términos de la ecuación anterior. De esta forma, el término de arrastre es descrito como:

$$M_{\phi,drag} = \frac{3}{4} \alpha_d \alpha_c \left( \frac{\alpha_c \rho_c C_{D,d}}{d_d} - \frac{\alpha_d \rho_d C_{D,c}}{d_c} \right) |U_r| U_r \quad (9)$$

Donde,  $U_r = U_d - U_c$  es el vector de velocidad relativa, y  $C_{D,d}$  y  $C_{D,c}$  son los coeficientes de arrastre para cada fase. Cuando  $Re$  asume un valor menor que 1000, el coeficiente de arrastre es considerado como igual a 0,44. Caso contrario, cuando  $Re$  es mayor o

igual a 1000, los coeficientes  $C_{D,d}$  y  $C_{D,c}$  son obtenidos de acuerdo con las siguientes ecuaciones:

$$C_{D,\varphi} = \frac{24}{Re_\varphi} (1 + 0.15 Re_\varphi^{0.687}) \quad (10)$$

$$Re_\varphi = \frac{|U_\varphi| d_\varphi}{\nu_\varphi} \quad (11)$$

Por otro lado, el término de *lift* es representado de la siguiente manera:

$$M_{\varphi, lift} = \alpha_d \alpha_c (\alpha_c C_{l,d} \rho_c - \alpha_d C_{l,c} \rho_d) U_r \times \nabla \times U_c \quad (12)$$

Finalmente, el término de la fuerza de *virtual mass* es calculado de acuerdo con la siguiente ecuación:

$$M_{\varphi, vm} = \alpha_d \alpha_c C_{vm} \rho_c \left( \frac{Dc}{Dt} U_c - \frac{Dd}{Dt} U_d \right) \quad (13)$$

Dónde:

$$\frac{Dc}{Dt} U_c = \frac{\partial U_c}{\partial t} + U_c \cdot \nabla U_c \quad (14)$$

$$\frac{Dd}{Dt} U_d = \frac{\partial U_d}{\partial t} + U_d \cdot \nabla U_d \quad (15)$$

## 2. El modelo de turbulencia.

Para añadir el efecto de la turbulencia al sistema bifásico disperso, se utiliza un modelo  $\kappa$ - $\epsilon$  de ecuaciones para la fase continua, y adopta la viscosidad de turbulencia para los cálculos de la fase dispersa.

La ecuación de energía cinética de turbulencia de la fase continua es:

$$\frac{\partial(\alpha_c k_c)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_c U_c k_c) - \nabla^2 (\sigma_k v_{c,eff} k_c) = \alpha_c G - \alpha_c \epsilon_c \quad (16)$$

Donde el término  $G$  es calculado por medio de:

$$G = 2v_{c,t} [\nabla U_c \cdot \text{dev}(\nabla U_c + \nabla^T U_c)] \quad (17)$$

La tasa de disipación de turbulencia es calculada con la ecuación de transporte:

$$\frac{\partial(\alpha_c \epsilon_c)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_c U_c \epsilon_c) - \nabla^2 (\sigma_\epsilon v_{c,eff} \epsilon_c) = C_1 \alpha_c G \frac{\epsilon_c}{\kappa_c} - C_2 \alpha_c \frac{\epsilon_c^2}{\kappa_c} \quad (18)$$

Por fin, la viscosidad de turbulencia de la fase continua es obtenida por medio de la **Ecuación 7**, mientras la viscosidad de turbulencia de la fase dispersa es estimada de la siguiente manera:

$$\nu_{d,t} = C_t^2 \nu_{c,t} \quad (19)$$

Donde los coeficientes  $C_\mu$  y  $C_t$  son constantes del modelo de turbulencia, estimados en:

Tabla 8. Coeficientes del modelo de turbulencia k- $\epsilon$ .

$C_M$	$C_1$	$C_2$	$\sigma_c$	$\sigma_k$
0,09	1,44	1,92	1,0	1,3

### A.3 ESTRUCTURA DE DIRECTORIOS Y ARCHIVOS

Todos los *solvers* del *OpenFoam* tienen tres directorios que contienen un conjunto básico de archivos para la ejecución de un caso. Para el *twoPhaseEulerFoam*, los tres directorios son definidos y divididos de la siguiente manera:

#### A.3.1 System

Establece los parámetros de ajuste asociados al proceso de solución. Tiene un mínimo de 3 archivos:

- controlDict: determina los parámetros de control;
- fvSchemes: indica los esquemas de discretización;
- fvSolution: establece las tolerancias y *solvers* de las ecuaciones implicadas.

#### A.3.2 Constant

Tiene un subdirectorio denominado *PolyMesh*, que describe la malla utilizada en el caso. Y además de este subdirectorio, hay diversos archivos que almacenan informaciones fundamentales para la definición de diferentes modelos y propiedades para la simulación de flujos bifásicos. Los archivos son:

- environmentalProperties: aceleración de la gravedad;

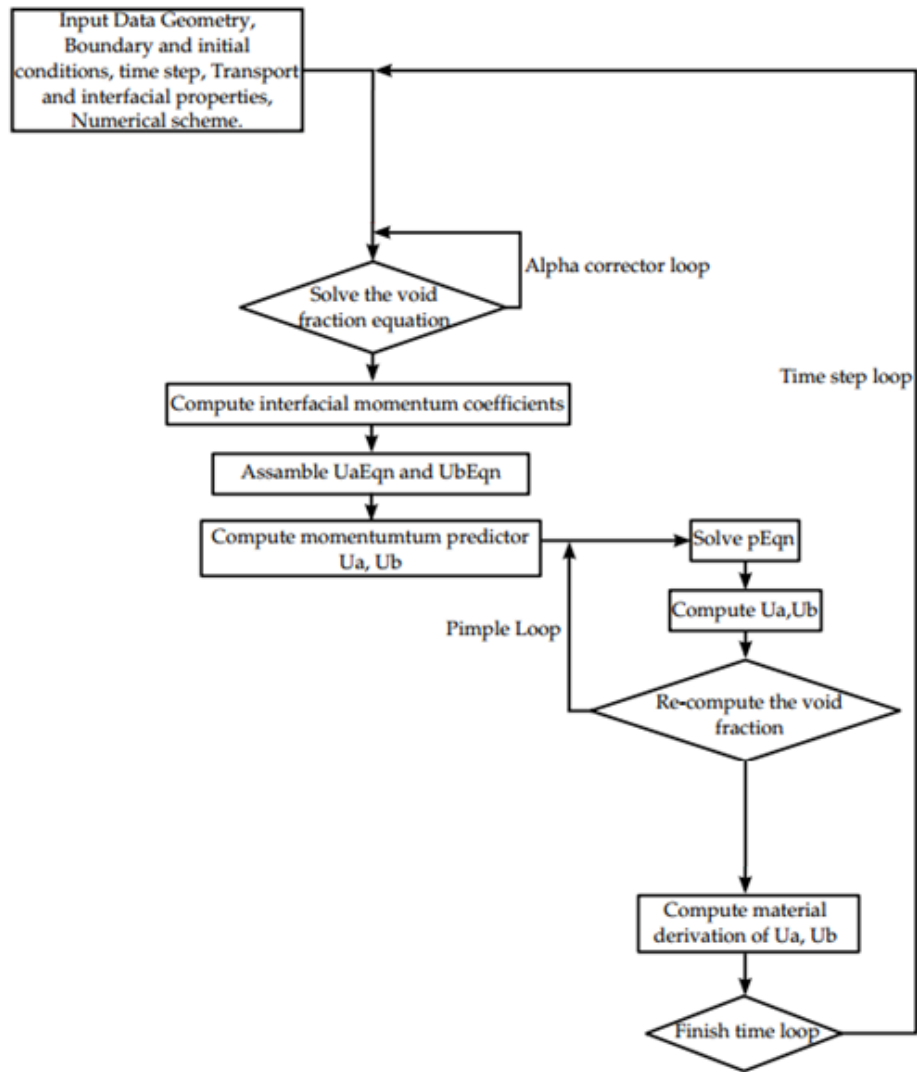
- interfacialProperties: modelo de arrastre a ser utilizado y determinación de la fase discreta;
- kineticTheoryProperties: constantes y modelos de teoría cinética para flujos granulares;
- ppProperties: límite de empaque y constantes para el cálculo de fuerzas partícula-partícula;
- transportProperties: viscosidad, diámetro de partícula y densidad de las dos fases;
- filterProperties: torna el flujo igual a cero en la posición del filtro y en el plano especificado;
- RASproperties: modelo de turbulencia.

### A.3.3 Directorios de tiempo

Estos directorios contienen archivos de datos para cada variable analizada, como: *alpha* (fracción de volumen), *p* (presión), *Ua* (velocidad fase a), *Ub* (velocidad fase b), *Theta* (temperatura granular), *k* (energía cinética de turbulencia) y  $\varepsilon$  (tasa de disipación turbulenta). Los datos en la carpeta de tiempo 0 son determinados por el usuario y son valores iniciales y condiciones de contorno que definen el problema. Por otro lado, los datos en las carpetas de los otros tiempos son los resultados obtenidos por el propio *OpenFoam*, después de ejecutado el *solver* para aquél tiempo.

## A.4 IMPLEMENTACIÓN

El procedimiento de solución adoptado por el *twoPhaseEulerFoam* sigue la secuencia de operaciones representada en la figura siguiente. El procedimiento está basado en el algoritmo de solución PIMPLE (PISO/SIMPLE), con *under-relaxation* para garantizar la convergencia de las ecuaciones multifásicas a cada *timeStep*.



**Figura 47.** Esquema de la secuencia de operaciones de solución del twoPhaseEulerFoam (adaptado de Corzo et al., 2012).

## LISTADO DE FIGURAS

<b>Figura 1.</b> Reacción de fusión entre deuterio y tritio, isótopos de hidrógeno.....	<b>3</b>
<b>Figura 2.</b> (a) esquema de operaciones de un TBB y (a) Reacciones implicadas en la fusión nuclear. ....	<b>5</b>
<b>Figura 3.</b> Configuraciones de flujos bifásicos gas-líquido. Adaptación de Yeoh y Tu (2010). ....	<b>11</b>
<b>Figura 4.</b> Configuraciones de régimen de burbujas en <i>bubble columns</i> . (Bouaifi et al., 2001). ....	<b>13</b>
<b>Figura 5.</b> Relación de la velocidad del gas y de las dimensiones de la columna utilizada, con el régimen de flujo favorable (Deckwer et al. ,1980). ....	<b>14</b>
<b>Figura 6.</b> Regiones identificadas en el régimen de flujo para columnas en 2D y 3D (Lin et al., 1996). ....	<b>15</b>
<b>Figura 7.</b> Descripción de la estructura de funcionamiento del OpenFOAM (OpenFOAM, User Guide, 2013). ....	<b>22</b>
<b>Figura 8.</b> La columna de 0.15x1x0.1 metros con una malla con (25 75 1) celdas. ....	<b>24</b>
<b>Figura 9.</b> Evolución de la fracción de volumen de fase dispersa y de la velocidad de la fase continua. ....	<b>27</b>
<b>Figura 10.</b> Evolución de la fracción de volumen de fase dispersa y de la velocidad de la fase continua. ....	<b>28</b>
<b>Figura 11.</b> Evolución de la fracción de volumen de fase dispersa y de la velocidad de la fase continua. ....	<b>28</b>
<b>Figura 12.</b> Evolución de la fracción de volumen de fase dispersa y de la velocidad de la fase continua ....	<b>29</b>
<b>Figura 13.</b> <i>Alpha</i> del gas y velocidad del líquido en el tiempo 7s.....	<b>30</b>
<b>Figura 14.</b> <i>Alpha</i> del gas y velocidad del líquido en el tiempo 9s.....	<b>30</b>
<b>Figura 15.</b> <i>Alpha</i> del gas y velocidad del líquido en el tiempo 12s.....	<b>31</b>
<b>Figura 16.</b> <i>Alpha</i> del gas y velocidad del líquido en el tiempo 16s.....	<b>31</b>
<b>Figura 17.</b> <i>Alpha</i> del gas y velocidad del líquido en el tiempo 20s.....	<b>32</b>
<b>Figura 18.</b> Dimensiones de la columna utilizada en el experimento. ....	<b>34</b>

<b>Figura 19.</b> Velocidad Alta, caudal de gas de 8 l/min. a) Fotografía de la columna y b) medidas de la velocidad del líquido (Becker et al., 1994). .....	35
<b>Figura 20.</b> Velocidad baja, caudal de gas de 1,6 l/min. Fotografía de la columna en intervalos de tiempo de $\Delta t=10s$ (Sokolichin et al., 1999). .....	36
<b>Figura 21.</b> Velocidad baja, caudal de gas de 1,6 l/min. Medida de velocidad del líquido en el punto A, región con burbujas y B, zona libre de burbujas (Sokolichin et al., 1999). .....	37
<b>Figura 22.</b> Secuencia de simulaciones realizadas con el <i>twoPhaseEulerFoam</i> . .....	44
<b>Figura 23.</b> Comportamiento de la fracción de volumen del aire y de la velocidad del líquido en un determinado tiempo (M1 – Laminar 2D). .....	45
<b>Figura 24.</b> Comportamiento de la velocidad vertical del líquido por el tiempo en un determinado punto A de la columna. (a) M1, (b) M2 y (c) M3. ....	46
<b>Figura 25.</b> Comportamiento de la fracción de volumen del aire y de la velocidad del líquido en un determinado tiempo (M1 – Turbulento 2D). .....	47
<b>Figura 26.</b> Comportamiento de la fracción de volumen del aire y de la velocidad del líquido en un determinado tiempo. (a) M4 y (b) M5. ....	48
<b>Figura 27.</b> Comportamiento de la velocidad vertical del líquido por el tiempo en un determinado punto A de la columna. (a) M4 y (b) M5. ....	49
<b>Figura 28.</b> Comportamiento de la fracción de volumen y de la velocidad del líquido con $\Delta t=10s$ (M1 – Laminar 2D). .....	50
<b>Figura 29.</b> Comportamiento de la fracción de volumen y de la velocidad del líquido con $\Delta t=10s$ (M2 – Laminar 2D). .....	51
<b>Figura 30.</b> Comportamiento de la fracción de volumen y de la velocidad del líquido con $\Delta t=10s$ (M3 – Laminar 2D). .....	51
<b>Figura 31.</b> Comportamiento de la velocidad vertical del líquido por el tiempo en un determinado punto A de la columna. (a) M1, (b) M2 y (c) M3. ....	52
<b>Figura 32.</b> (a) Comportamiento de la fracción de volumen y de la velocidad del líquido en un determinado tiempo, y (b) Comportamiento de la velocidad vertical del líquido por el tiempo en un determinado punto A de la columna (M1 – Turbulento 2D). .....	54
<b>Figura 33.</b> Comportamiento de la velocidad vertical del líquido por el tiempo en un determinado punto A de la columna (Sokolichin et al., 1999). .....	55
<b>Figura 34.</b> Comportamiento de (a) la fracción de volumen y de (b) la velocidad del líquido en un determinado tiempo. ....	56



<b>Figura 35.</b> Comportamiento de la velocidad vertical del líquido por el tiempo en el (a) punto A y (b) punto B. (M4 – Turbulento 3D).....	57
<b>Figura 36.</b> Comportamiento de la fracción de volumen y de la velocidad del líquido en un determinado instante de tiempo. ....	58
<b>Figura 37.</b> (a) Representación del <i>blanket</i> que circunda la zona del plasma y (b) módulos de <i>breeding blanket</i> en detalle. ....	62
<b>Figura 38.</b> Geometría 2D del canal de metal líquido.....	63
<b>Figura 39.</b> (a) Malla Gruesa – M1, (b) Malla Fina – M2 y (c) Malla Doble Fina – M3....	65
<b>Figura 40.</b> Simulaciones realizadas para el caso de interés.....	66
<b>Figura 41.</b> Resultados obtenidos para la fracción de volumen de la fase dispersa y la velocidad del líquido (M1).....	68
<b>Figura 42.</b> Resultados obtenidos para la fracción de volumen de la fase dispersa y el perfil la velocidad del líquido (M2). ....	69
<b>Figura 43.</b> Resultados obtenidos para la fracción de volumen de la fase dispersa y el perfil la velocidad de la fase continua (M3). ....	70
<b>Figura 44.</b> Resultados obtenidos para la generación de $10^{-9}$ y micro diámetros, donde (a) $Re = 10$ y (b) $Re = 500$ (Malla doble fina – MDF).....	72
<b>Figura 45.</b> Soluciones para nano burbujas y (a) $Re = 10$ y (b) $Re = 500$ . (Malla MDF) ...	74
<b>Figura 46.</b> Solución para nano burbujas y $Re = 500$ con leyenda mejorada.....	75
<b>Figura 47.</b> Esquema de la secuencia de operaciones de solución del twoPhaseEulerFoam (adaptado de Corzo et al., 2012). ....	86



## LISTADO DE TABLAS

<b>Tabla 1.</b> Coeficientes del modelo de turbulencia $k$ - $\epsilon$ .....	20
<b>Tabla 2.</b> Condiciones iniciales determinadas para el tutorial <i>bubbleColumn</i> . ....	25
<b>Tabla 4.</b> Parámetros calculados y utilizados para la simulación con el <i>twoPhaseEulerFoam</i> .....	40
<b>Tabla 5.</b> Condiciones iniciales y de contorno para el caso reproducido en 2D.....	41
<b>Tabla 6.</b> Condiciones iniciales y de contorno para el caso reproducido en 3D.....	42
<b>Tabla 7.</b> Mallas testadas. ....	43
<b>Tabla 8.</b> Condiciones iniciales y de contorno.....	64



## REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BATET, L., FRADERA, J., MAS DE LES VALLS, E. and SEDANO, L. A. (2011) Numeric implementation of a nucleation, growth and transport modelo for helium bubbles in lead-lithium HCLL breeding blanket channels: Theory and code development. *Fusion Engineering and Design*, 86, 421-428.

BECKER, S., SOKOLICHIN, A., and EIGENBERGER, G. (1994) Gas-liquid flow in bubble columns and loop reactors: Part II. Comparison of detailed experiments and flow simulations. *Chemical Engineering Science*, 49(24B), 5747-5762.

BOUAIFI, M., HEBRARD, G., BASTOUL, D., and ROUSTAN, M. (2001) A comparative study of gas hold-up, bubble size, interfacial area and mass transfer coefficients in stirred gas-liquid reactors and bubble columns. *Chemical Engineering and Processing*, 40, 97-111.

BRENNER, C. E. (2005) Fundamentals of Multiphase Flow. *Cambridge University Press*. Cambridge, UK.

CHEN, R. C., REESE, J. and FAN, L-S. (1994). Flow Structure in a Three-Dimensional Bubble Column and Three-Phase Fluidized Bed. *AIChE Journal*, 40, 1093.

CONRAD, R., DEBARBERIS, L., COEN, V. and FLAMENT, T. (1991) Irradiation of liquid breeder material Pb-17Li with in-situ tritium release measurements in the LIBRETTO 2 experiment, *Journal of Nuclear Materials*, 875-878.

CORZO, S. F., DAMIÁN, S. M., RAMAJO, D., and NIGRO, N. M. (2012) Numerical Simulation of Bubbly Two-Phase Flow Using Eulerian-Eulerian Model. *Mecánica Computacional*, XXXI, 85-112.

DECKWER, W.-D., LOUISI, Y., ZALDI, A., and RALEK, M. (1980) Hydrodynamic Properties of the Fischer-Tropsch Slurry Process. *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, 19, 699-708.

- DELNOIJ, E., LAMMERS, F. A., KUIPERS, J. A. M., and VAN SWAAIJ, W. P. M. (1997) Dynamic simulation of dispersed gas-liquid two-phase flow using a discrete bubble model. *Chemical Engineering Science*, 52 (9), 1429 - 1458.
- FISCHER, U., GROßE, D., MORO, F., PERESLAVTSEV, P., PETRIZZI, L., VILLARI, R. and WEBER, V. (2011) Integral approach for neutronics analyses of the European test blanket modules in ITER. *Fusion Engineering and Design*, 86, 2176-2179.
- FRADERA, J., SEDANO, L., MAS DE LES VALLS, E. and BATET, L. (2011) Implementation of two-phase tritium models for helium bubbles in HCLL breeding blanket modules. *Journal of Nuclear Materials*, 417, 739-742.
- FUNDACIÓN OpenFOAM: <http://www.openfoam.org/> (consulta 20/03/2013).
- FUSION FOR ENERGY, European Joint Undertaking for ITER and the Development of Fusion Energy: <http://fusionforenergy.europa.eu/> (consulta 30/04/2013).
- HOOMANS, B. P. B., KUIPERS, J. A. M., BRIELS, W. J. and VAN SWAAIJ, W. P. M. (1996) Discrete particle simulation of bubble and slug formation in a two dimensional gas-fluidised bed: a hard sphere approach. *Chemical Engineering Science*, 51.
- HYNDMAN, C. L., LARACHI, F., and GUY, C. (1997) Understanding gas-phase hydrodynamics in bubble columns: a convective model based on kinetic theory. *Chemical Engineering Science*, 52 (1), 63-77.
- ITER ORGANIZATION: <http://www.iter.org/> (consulta 15/05/2013).
- KANTARCI, N., BORAK, F., and ULGEN, K. O. (2005) Review. Bubble column reactors. *Process Biochemistry*, 40, 2263-2283.
- LIN, T.-J., REESE, J., and FAN, L.-S. (1996) Quantitative Analysis and Computation of Two-Dimensional Bubble Columns. *AIChE Journal*, 42 (2), 301-318.
- MAS DE LES VALLS, E., BATET, L., de MEDINA, V., FRADERA, J. and SEDANO, L. (2011) Modelling of integrated effect of volumetric heating and magnetic field on tritium transport in a U-bend flow as applied to HCLL blanket concept. *Fusion Engineering and Design*, 86, 341-356.

MAS DE LES VALLS, E., SEDANO, L. A., BATET, L., RICAPITO, I., AIELLO, A., GASTALDI, O. and GABRIEL, F. (2008) Lead-lithium eutectic material database for nuclear fusion technology. *Journal of Nuclear Materials*, 376, 353-357.

MOREIRA, T. M. (2012). *Contribuição para a validação do código numérico OpenFOAM em escoamentos com superfície livre*. Master thesis, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade Nova de Lisboa, Lisboa.

MUDDE, R. F., and SIMONIN, O. (1999) Two- and three-dimensional simulations of a bubble plume using a two fluid model. *Chemical Engineering Science*, 54, 5061-5069.

OpenFOAM (2013) The Open Source CFD Toolbox. User Guide. *OpenFOAM Foundation*.

PAN, Y., DUDUKOVIC, M. P., and CHANG, M. (2000) Numerical Investigation of Gas-Driven Flow in 2-D Bubble Columns. *AIChE Journal*, 46 (3), 434-449.

PERRY, R. H., BENSKOW, L. R., BEIMESCH, W. E., et al. (2008) *Perry's Chemical Engineers' Handbook*. 8 ed. McGraw-Hill. New York, NY.

REESE, J., CHEN, R. C., TZENG, J.-W. and FAN, L.-S. (1993). Characterization of the Macroscopic Flow Structure in Gas-Liquid and Gas-Liquid-Solid Fluidization Systems Using Particle Image Velocimetry. *Int. Video J. Eng. Res.*, 3 (17).

RUSCHE, H. (2002). *Computational Fluid Dynamics of Dispersed Two-Phase Flows at High Phase Fractions*. Ph.D thesis, University of London, Imperial College of Science, Technology & Medicine, London.

SANYAL, J., VÁSQUEZ, S., ROY, S., and DUDUKOVIC, M. P. (1999) Numerical simulation of gas-liquid dynamics in cylindrical bubble column reactors. *Chemical Engineering Science*, 54, 5071-5083.

SOKOLICHIN, A., and EIGENBERGER, G. (1999) Applicability of the standard  $k-\epsilon$  turbulence model to the dynamic simulation of bubble columns: Part I. Detailed numerical simulations. *Chemical Engineering Science*, 54, 2273-2284.

SOMMERFELD, M., DECKER, S. and KOHNEN, G. (1997) *Time-dependent calculation of bubble columns based on Reynolds-averaged Navier-Stokes equations with  $k-\epsilon$  turbulence*

*model*. Proceedings of the 2nd Japanese-German Symposium on Multi-Phase Flow. Tokyo, Paper No. 3-1-4, pp. 323-334.

TAYLOR, N. (2012) Safety issues for fusión nuclear facilities and lessons learned from ITER. Proceedings of the 1st IAEA DEMO Programme WorkShop, UCLA.

THAKKER, M., VAGHELA, A., RANA, P., RAO, C. V. S., BASU, T. K. and ABHANGI, M. (2012) Conceptual Design of Tritium Extraction System. *International Journal of Scientific Engineering and Technology*, 1 (3), 34-35.

YEOH, G. H.; TU, J. (2010) Computational Techniques for Multi-Phase Flows. *Elsevier Ltd*. Oxford, UK.